LUMEN ET VIRTUS
ISSN: 2177-2789

USO DA BIOINFORMÁTICA PARA SELECIONAR MOLÉCULAS CANDIDATAS A FÁRMACOS

USE OF BIOINFORMATICS TO SELECT CANDIDATE DRUG MOLECULES

USO DE LA BIOINFORMÁTICA PARA SELECCIONAR MOLÉCULAS CANDIDATAS A FARMACOS

https://doi.org/10.56238/levv16n53-039

Data de submissão: 10/09/2025 **Data de publicação:** 10/10/2025

Jullyana Bicalho Costa
Mestrado
Instituição: Universidade Federal de Juiz de Fora
E-mail: jullyanabicalho17@gmail.com
Orcid: https://orcid.org/0000-0002-7137-9359
Lattes: http://lattes.cnpq.br/1811532933524810

Tainara Soares dos Santos
Graduação
Instituição: Universidade Federal de Juiz de Fora
E-mail: tainara.s.santos0@gmail.com
Orcid: https://orcid.org/0009-0008-0691-7457
Lattes: https://lattes.cnpq.br/1306245554915907

Larissa Moura de Matos Franco
Mestrado
Instituição: Universidade Federal de Juiz de Fora
E-mail: larissammf2@gmail.com
Orcid: https://orcid.org/0009-0008-0691-7457
Lattes: http://lattes.cnpq.br/5818351350295605

Ana de Araújo Sathler
Mestrado
Instituição: Universidade Federal de Juiz de Fora
E-mail: anasathler1994@outlook.com
Orcid: https://orcid.org/0009-0009-7896-2887
Lattes: http://lattes.cnpq.br/9120688268358031

Michelle Bueno de Moura Pereira
Doutorado
Instituição: Universidade Federal de Juiz de Fora
E-mail: michelle.antunes@ufjf.br
Orcid: https://orcid.org/0000-0003-2065-1700
Lattes: http://lattes.cnpq.br/3378998327997426

João Eustáquio Antunes
Doutorado
Instituição: Universidade Federal de Juiz de Fora
E-mail: joao.antunes@ufjf.br
Orcid: https://orcid.org/0000-0003-1693-5823
Lattes: http://lattes.cnpq.br/5458972809338036

RESUMO

O desenvolvimento de novos fármacos pode apresentar diversos problemas, sendo um importante gargalo deste processo a capacidade de conciliar uma molécula que seja um potente inibidor farmacológico e que também tenha sua síntese possível de ser executada. Estudos computacionais prévios devem ser executados para direcionar moléculas com bons parâmetros farmacocinéticos, alta atividade biológica e também grande possibilidade de serem sintetizadas. Dentre várias ferramentas computacionais usadas no estudo de novos fármacos tem-se aquelas usadas para a predição de parâmetros farmacocinéticos. Após a identificação e validação de um alvo farmacológico, por exemplo, enzimas quinases em câncer, pode-se planejar moléculas promissoras para este alvo. Se o tipo de câncer for cerebral estudos de moléculas promissoras com a capacidade de atravessar a barreira hematoencefálica podem contribuir de maneira expressiva. Assim, o objetivo deste estudo é realizar estudos computacionais para seleção de moléculas promissoras para o tratamento de câncer cerebral. Para realização deste estudo foram selecionadas 98 moléculas. Como critério para essa seleção foi, primeiramente, avaliar a possibilidade de síntese destas moléculas. Em seguida, estudos computacionais realizados para avaliar parâmetros farmacocinéticos, capacidade de inibir quinases e de atravessar a barreira hematoencefálica. O resultado obtido neste estudo permitiu selecionar cinco moléculas mais promissoras. Tais moléculas poderão ser sintetizadas e testadas em experimentos in vitro. Pode-se concluir, portanto, que tal estudo permitiu a redução de um número considerado elevado de moléculas propostas para um número reduzido daquelas consideradas mais promissoras, reduzindo assim o tempo e dinheiro para o desenvolvimento de moléculas promissoras para o tratamento de desse tipo de câncer.

Palavras-chave: Câncer. Desenvolvimento de Novos Fármacos. Bioinformática.

ABSTRACT

The development of new drugs can present several challenges, with a significant bottleneck being the ability to combine a molecule that is both a potent pharmacological inhibitor and achievable for synthesis. Prior computational studies must be performed to identify molecules with good pharmacokinetic parameters, high biological activity, and a high likelihood of being synthesized. Among the various computational tools used in the study of new drugs are those used to predict pharmacokinetic parameters. After identifying and validating a pharmacological target, such as kinase enzymes in cancer, promising molecules can be designed for this target. If the cancer is brain cancer, studies of promising molecules with the ability to cross the blood-brain barrier can be significantly beneficial. Therefore, the objective of this study is to conduct computational studies to select promising molecules for the treatment of brain cancer. Ninety-eight molecules were selected for this study. The selection criterion was, first, to assess the feasibility of synthesizing these molecules. Next, computational studies were performed to evaluate pharmacokinetic parameters, kinase inhibition, and blood-brain barrier crossing. The results of this study allowed the selection of five most promising molecules. These molecules can be synthesized and tested in vitro. Therefore, it can be concluded that this study allowed the reduction of a considered large number of proposed molecules to a small number of those considered most promising, thus reducing the time and cost required to develop promising molecules for the treatment of this type of cancer.

Keywords: Cancer. New Drug Development. Bioinformatics.

RESUMEN
El desarrollo de nuevos fármacos puede presentar diversos desafíos, siendo un obstáculo importante la capacidad de combinar una molécula que sea a la vez un potente inhibidor farmacológico y factible para la síntesis. Es necesario realizar estudios computacionales previos para identificar moléculas con buenos parámetros farmacocinéticos, alta actividad biológica y alta probabilidad de ser sintetizadas. Entre las diversas herramientas computacionales utilizadas en el estudio de nuevos fármacos se encuentran las que permiten predecir los parámetros farmacocinéticos. Tras identificar y validar una diana farmacológica, como las enzimas quinasas en el cáncer, se pueden diseñar moléculas prometedoras para dicha diana. Si se trata de un cáncer cerebral, los estudios de moléculas prometedoras con capacidad para atravesar la barrera hematoencefálica pueden ser significativamente beneficiosos. Por lo tanto, el objetivo de este estudio es realizar estudios computacionales para seleccionar moléculas prometedoras para el tratamiento del cáncer cerebral. Se seleccionaron noventa y ocho moléculas para este estudio. El criterio de selección fue, en primer lugar, evaluar la viabilidad de sintetizar estas moléculas. A continuación, se realizaron estudios computacionales para evaluar los parámetros farmacocinéticos, la inhibición de quinasas y el cruce de la barrera hematoencefálica. Los resultados de este estudio permitieron seleccionar las cinco moléculas más prometedoras. Estas moléculas pueden sintetizarse y probarse in vitro. Por lo tanto, se puede concluir que este estudio permitió reducir un gran número de moléculas propuestas a un pequeño número de las consideradas más prometedoras, reduciendo así el tiempo y el coste necesarios para desarrollar moléculas prometedoras para el tratamiento de este tipo de cáncer.

Palabras clave: Cáncer. Desarrollo de Nuevos Fármacos. Bioinformática.

1 INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de novos fármacos pode apresentar diversos problemas, sendo um importante gargalo a capacidade de conciliar uma molécula que seja um potente inibidor farmacológico e que também tenha sua síntese possível de ser executada (GOLAN et al., 2008). Estudos computacionais prévios devem ser executados para selecionar moléculas com bons parâmetros farmacocinéticos, alta atividade biológica e também grande possibilidade de serem sintetizadas (FERNANDES et al., 2015). Esses estudos podem avaliar se uma molécula apresenta boa biodisponibilidade oral através da regra dos cinco de Lipinski. Essa regra tem como objetivo auxiliar químicos medicinais em decisões que estão relacionadas com modificações químicas, fazendo com que compostos com propriedades físico-químicas indesejáveis não sejam preparados. A regra foi criada com cinco propriedades moleculares que são importantes, sendo elas o log P, o número de doadores de ligações de hidrogênio, o número de aceptores de ligações de hidrogênio, o peso molecular, bem como, os pontos de interação para os principais alvos de fármacos, como os ligantes de receptores acoplados à proteína G, inibidores de quinases, moduladores de canais iônicos e receptores nucleares (SANTOS et al., 2018). A regra foi criada a partir de diversos fármacos estudados, que demonstraram baixa atividade farmacológica causada pela baixa absorção e permeabilidade, que foram consequência das seguintes propriedades: mais de cinco centros doadores de ligação de hidrogênio, mais do que 10 aceptores de ligação de hidrogênio, peso molecular maior que 500 unidades e Log P calculado maior do que 5, sendo todos parâmetros múltiplos de 5. A análise criada por Lipinski têm grande relevância e demonstra a importância da lipofilia na atividade farmacológica e no planejamento racional de qualquer fármaco (MIKOVSKI et al., 2018). Além da regra dos 5, o fármaco também necessita apresentar boas propriedades farmacodinâmicas e farmacocinéticas. As propriedades farmacodinâmicas demonstram as interações envolvidas no reconhecimento molecular dinâmico do ligante ao receptor e os grupos farmacofóricos definem a afinidade. As propriedades farmacocinéticas determinam a absorção, distribuição, metabolismo e eliminação do fármaco. As duas propriedades em conjunto irão determinar o perfil de eficácia e biodisponibilidade do fármaco (BARREIRO, 2007). A inserção de um novo medicamento no mercado pode ser demorada e dispendiosa até que se prove sua eficácia e segurança. Ao inserir um novo medicamento no mercado, é necessário provar que este candidato a fármaco tenha eficácia e segurança, tornando esse processo demorado. Através das abordagens de bioinformática como o método *in silico*, torna-se possível otimizar esse tempo e diminuir os gastos na produção desse novo medicamento. Isso porque através desses estudos *in silico*, é possível prever os perfis de absorção, distribuição, metabolismo, excreção e toxicidade (ADMET) fazendo com que o processo de descoberta seja mais rápido e de menor custo financeiro (PINHEIRO et al., 2022).

1.1 ETAPAS PARA DESCOBERTA DE NOVOS FÁRMACOS

A descoberta de um novo medicamento é iniciada quando há uma doença ou condição clínica que não possua produtos médicos adequados disponíveis, tornando uma necessidade clínica não atendida (HUGUES *et al.*, 2011). O processo da descoberta de fármacos é dividido em duas classes: descoberta e desenvolvimento (LOMBARDINO e LOWE, 2004). A fase inicial da busca pelo novo fármaco abrange a identificação e otimização de moléculas capazes de representar uma nova entidade química. (GUIDO et al., 2010).

As moléculas bioativas têm sua busca realizada através de triagens reais ou virtuais de produtos naturais, compostos sintéticos ou coleções combinatórias, e ainda através de planejamento racional (GUIDO et al., 2010). Quando há o conhecimento do alvo macromolecular como o complexo ligante-receptor torna-se possível o uso das estratégias de planejamento de novos fármacos baseadas na estrutura do receptor, sendo essa uma abordagem fisiológica, que se baseia no mecanismo de ação pretendido. Esta abordagem é fundamentada no conhecimento prévio do processo fisiopatológico e alvo terapêutico. Este alvo, sendo uma enzima ou um receptor, pode ter sua estrutura molecular bem conhecida ou não. Quando há o conhecimento do sítio de interação, torna-se possível desenhar inibidores ou ativadores enzimáticos assim como agonistas ou antagonistas de receptores. Ao encontrar esse novo candidato a fármaco, identificam-se suas propriedades farmacodinâmicas a fim de analisar se suas propriedades estruturais são aptas para o reconhecimento molecular. Quando necessário são introduzidas modificações moleculares nesses candidatos a fármaco para melhorar seu perfil de biodisponibilidade (BARREIRO, 2014; ANDRADE et al., 2016). No entanto, quando a estrutura alvo não é conhecida podem ser utilizados métodos de desenho de drogas baseados na estrutura do ligante em que são investigadas suas propriedades e características de séries de ligantes bioativos (ANDRADE et al., 2016). Quando não há conhecimento do sítio de interação, o desenho molecular do inibidor/ativador enzimático ou agonista/antagonista do receptor inicia-se a partir da estrutura da micromolécula endógena que está envolvida no processo fisiopatológico, podendo identificar assim um novo análogo. Após ser descoberto este novo análogo deve ser otimizado e suas propriedades farmacocinéticas, farmacodinâmicas e toxicidade devem ser testadas (BARREIRO, 2014).

Um dos passos mais importantes para o desenvolvimento de um novo medicamento é a identificação e validação do alvo (HUGUES et al., 2011). A validação é de extrema importância no processo fisiopatológico e sua modulação seletiva tem grande impacto no tratamento ou cura da doença (Guido *et al.*, 2010). O objetivo da validação é prever se a modulação do alvo terapêutico será capaz de gerar uma resposta biológica satisfatória, suas técnicas variam de ferramentas *in vitro* ao uso de modelos de animais inteiros e à modulação de um alvo desejado em pacientes doentes. Cada abordagem é válida entre si, mas o resultado observado tem maior confiança quando realizada uma abordagem de validação múltipla (ANDRADE et al., 2016; HUGUES et al., 2011).

Após ser identificado e otimizado, inicia-se o desenvolvimento do fármaco passando pelos estudos clínicos de fase I que identificam a toxicidade em indivíduos saudáveis, fase clínica II que realiza estudos de eficácia e segurança, fase clínica III eficácia e segurança em populações maiores. Também é realizado estudos farmacocinéticos, tais como absorção, distribuição, metabolismo e excreção e, então, após passar por todas essas análises é realizada a requisição para aprovação do novo fármaco nos órgãos reguladores tal como Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANIVISA). E após ser aprovado, existe ainda a fase IV onde realiza a Farmacovigilância pós- comercialização (GUIDO et al., 2010).

1.2 FERRAMENTAS PARA A DESCOBERTA DE NOVOS FÁRMACOS

A abordagem para estudos de descoberta de novos fármacos que usam a bioinformática levou a um aumento significativo na identificação de alvos terapêuticos. Tal ferramenta pode auxiliar não só na identificação, mas também na seleção e priorização de possíveis alvos de doenças (YANG et al., 2009). Com o auxílio das metodologias de bioinformática tornou-se possível delinear a identificação, seleção e otimização de moléculas que são capazes de interagir com alta afinidade e seletividade com um alvo molecular selecionado. Tal alvo pode ser uma enzima ou receptor. Várias estratégias podem ser empregadas nesta abordagem, dentre elas a organização de bases de dados, a aplicação de filtros moleculares, o emprego de triagens biológicas automatizadas em alta escala e o uso da triagem virtual (GUIDO et al., 2010).

Uma ferramenta para a descoberta de novos fármacos é a investigação intensiva de SAR (Relação estrutura-atividade) em torno de cada estrutura de composto central, com medições sendo feitas para estabelecer a magnitude da atividade e a seletividade de cada composto. A investigação é realizada sistematicamente e, quando há informações estruturais sobre o alvo, podem ser utilizadas técnicas de desenho de moléculas baseadas em estrutura usando modelagem molecular e metodologias como cristalografia de raios-X (HUGUES et al., 2011).

A modelagem *in silico* das propriedades farmacocinéticas ADME (a absorção, distribuição, metabolismo e excreção) pode ser realizada por diversas abordagens, variando de abordagens de banco de dados, como a relação estrutura-atividade quantitativa (QSAR), pesquisas de similaridade, QSAR tridimensional, a métodos baseados em estrutura, como ancoragem de ligante-proteína e modelagem farmacofórica (ANDRADE et al., 2016).

O estudo através da triagem virtual baseado na estrutura do ligante, ocorre de acordo com as informações sobre o arranjo topológico dos alvos biológicos, sendo esta informação obtida por análise de estruturas cristalizadas, Ressonância nuclear magnética (NMR) ou modelagem por homologia. A triagem virtual baseada na estrutura do receptor emprega métodos de estudos tais como *molecular docking* na análise de grandes bases de dados de compostos para realizar a caracterização de um espaço

químico e biológico ideal, tal como sítio ativo de uma enzima e permitir a seleção de compostos para testes bioquímicos e/ou biológicos (ANDRADE et al., 2016).

1.3 USO DA BIOINFORMÁTICA PARA A DESCOBERTA DE NOVOS FÁRMACOS

As ferramentas de bioinformática têm papel fundamental na obtenção de uma melhor compreensão dos efeitos das variantes genômicas na eficácia e toxicidade dos medicamentos, estudos *in silico* de várias propriedades das moléculas candidatas à fármaco auxiliando assim as empresas farmacêuticas. Essas informações são utilizadas para melhorar a qualidade dos alvos enviados para testes de medicamentos, com o objetivo de minimizar o custo do desenvolvimento de medicamentos (MAH et al., 2011). Sendo assim, a bioinformática nos permite reduzir o tempo de produção desses novos medicamentos e reduzir as despesas de pesquisa e desenvolvimento de medicamentos, tornando-os mais produtivos (LIANG et al., 2019). Essas ferramentas possibilitam a organização, o gerenciamento, a visualização e interpretação da informação gerada e tem como objetivo o estabelecimento de padrões de correlação entre inúmeros eventos bioquímicos e celulares envolvidos no estado de doença (GUIDO et al., 2010).

A bioinformática combina diversas ferramentas da matemática, ciência da computação e biologia tornando possível elucidar e entender com mais eficiência as implicações biológicas e o significado de uma variedade de dados de sequência e estrutura, assim como desvendar dados biológicos, o que tem auxiliado fortemente na pesquisa e no desenvolvimento de muitas áreas relativas à biologia (LIANG et al., 2019). A revolução biotecnológica fornece informações úteis para a descoberta de fármacos, gerando uma variedade de aplicações por meio do monitoramento de indicadores celulares ou bioquímicos, essas aplicações se iniciam nas etapas de identificação de alterações fisiológicas e/ou metabólicas induzidas pelo estado de doença e permanecem até a avaliação dos efeitos dos fármacos sobre o organismo humano (GUIDO et al., 2010).

1.4 INIBIDORES DE QUINASES

Em todas as proteínas quinases existe um domínio catalítico que contém uma fenda onde se liga uma molécula de ATP. Quando ocorre uma alteração conformacional destas enzimas, bloqueiam- se os sítios de ligação de ATP causando então uma inibição alostérica. Essa inibição alostérica é muito utilizada no planejamento de fármacos e em especial moléculas de baixa massa molecular (SILVA et al., 2009). Os inibidores de proteínas quinases permeiam as células e se tornam reagentes importantes na investigação dos papéis fisiológicos das proteínas quinases, pois podem rapidamente bloquear a atividade de quinases endógenas em células e tecidos normais, bem como em linhagens celulares transformadas. Existe uma infinidade de inibidores de proteínas quinases e com essa variedade torna-

se difícil a escolha de molécula que poderá ser um inibidor específico de uma proteína quinase (BAIN et al., 2007).

Alterações genéticas, incluindo mutações, superexpressão, translocações e desregulação das proteínas quinases ocasionam diversas doenças como doenças autoimunes, cardiovasculares, inflamatórias e nervosas, e também o câncer. Por esse motivo, cerca de 20 a 33% do empenho de descoberta de medicamentos envolvem as proteínas quinases. Um grande número de inibidores de proteína quinase de pequenas moléculas já foi aprovado pela Food and Drug Administration (FDA) dos EUA, sendo quase todos eficazes por via oral (ROSKOSKI, 2020). As quinases estão envolvidas em papéis-chave de diversas vias que interfere em processos fisiológicos essenciais, principalmente no câncer, como transcrição, metabolismo, progressão do ciclo celular, apoptose e desenvolvimento. Isso ocorre em grande parte pois as proteínas quinases catalizam a transferência de fosfato do trifosfato de adenosina (ATP) para um resíduo de serina, treonina ou tirosina de uma proteína. Com todos esses fatores, a inibição seletiva de quinases é uma abordagem terapêutica muito aceita para o tratamento do câncer (PATEL e DOERKISEN, 2010).

1.5 BARREIRA HEMATOENCEFÁLICA

Através de experimentos realizados pelo cientista Paul Ehrlich foi criado o conceito de barreira hematoencefálica (BHE), que surgiu no final do século XIX, na Alemanha, após injeções de corantes em animais tanto na circulação arterial como na venosa todos os órgãos, exceto o cérebro e a medula espinhal, se coravam, levando a hipótese de dois compartimentos (ROJAS et al., 2011).

A BHE é um importante componente de uma rede de comunicação conectando o sistema nervoso central e os tecidos periféricos, também funciona como uma interface que limita e regula a troca de substâncias entre sangue e o sistema nervoso central (BANKS, 2006). A impermeabilidade da BHE é o resultado de uma série de características únicas, que acrescenta dificuldade as moléculas tentando penetrar nesta barreira. Esta propriedade é baseada na existência de uma permeabilidade muito restrita do endotélio, além da presença de enzimas degradantes presentes em grande número no interior do endotélio de modo que, com exceção de água, gases como oxigênio e o dióxido de carbono e determinadas moléculas lipossolúveis muito pequenas podem passar de forma íntegra. As moléculas hidrofílicas, que são essenciais para o metabolismo do cérebro, tais como íons, glicose, aminoácidos e componentes de ácido nucléico, passam pela BHE através de canais especializados (BEGLEY, 2003). No transporte das moléculas hidrofílicas, tais como peptídeos e proteínas que não têm um sistema de transporte específico, o transporte ocorre de forma mais lenta do que nas moléculas lipofílicas, porém podem atravessar quantidades suficientes para causam um efeito mediado por receptores nos neurônios. Alguns tipos especiais de proteínas ou peptídeos como, por exemplo, hormônios periféricos e peptídeos regulatórios que exercem sua ação no cérebro geralmente têm sistemas especializados de

transporte saturável em toda a BHE. Através disso a BHE se torna altamente restritiva, mas ainda pode ser incapaz de impedir a passagem de algumas toxinas e agentes terapêuticos, tais como os fármacos da corrente sanguínea para o cérebro (BANKS, 2010).

1.6 SÍNTESE DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS

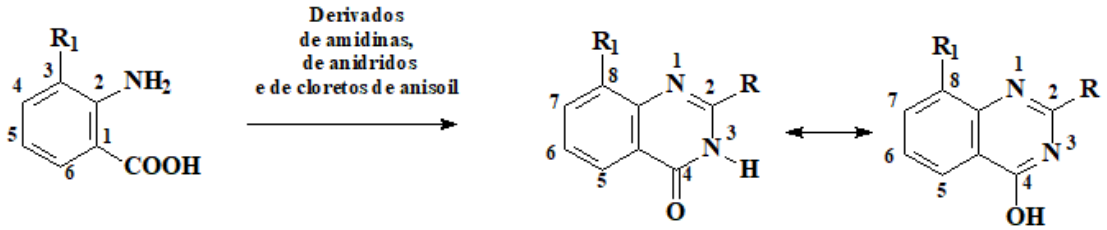
A síntese de moléculas orgânicas é uma etapa limitante do desenvolvimento de novos fármacos (GOLAN et al., 2008). Assim, torna-se importante a identificação de um grupo farmacofórico cuja rotas sintéticas sejam conhecidas e testadas. O farmacófaro quinazolina, por exemplo, é amplamente reconhecido em síntese orgânica e pode ser encontrado em uma grande variedade de compostos diferentes, como por exemplo, nos derivados de 4-anilinoquinazolinas, com propriedades biológicas reconhecidas (REWCASTLE, 2000). Esses compostos já foram reportados na literatura como inibidores potentes e seletivos da atividade de tirosina quinases da família de receptores do fator de crescimento endotelial EGF (FRY, 1994). Além disso, o conhecimento do processo de inibição dessas enzimas parece ser o caminho para a terapia de muitas doenças, tais como câncer, “psoriasis”, diabetes, doenças cardiovasculares entre outras (LEVITZKI, 2006).

Desenvolver uma molécula promissora para ser novo fármaco requer conhecimento de diversas ferramentas computacionais, tais como a bioinformática. Assim, estudos como este podem ajudar a encontrar moléculas promissoras para tratamento de câncer cerebral.

2 METODOLOGIA

O uso de esquema de rotas sintéticas conhecidos foi utilizado para selecionar possíveis moléculas com potencial para serem sintetizadas (Esquema 1).

Esquema 1 – Procedimento de ciclização para derivados de 4-(3*H*)-quinazolinonas. *Reagentes e condições*: (a) acetato de formamidina, 140□C, 8h; (b) dicloridrato de guanidina; NaOEt, EtOH, 130□C, 5h. (c) dibromoidrato de 2-aminoacetamidina, MeOH, 80□C, 6h; (d-e) anidridos acético e benzóico, refluxo, 2h e NH_3; (f-h) (i) Cloreto de *o, m, p*-anisoila, Et_3N (2 eq), THF, TA, 3h; ii) NH_3; iii) 5% KOH aq, EtOH, refluxo, 1h.



Fonte: Elaborada pelo autor. (2025)

No esquema 1 os substituintes R e R1 foram racionalmente testados para possibilidade de execução da síntese e as outras etapas de estudos *in silico*. A partir do esquema 1 foram testadas 98 moléculas. Para todas as moléculas propostas foi mantido o mesmo grupo farmacofórico variando

apenas os substituintes. Todas as moléculas propostas foram desenhadas em programas computacionais tais como *ChemSketch* e *MarvinSketch*. Em seguida, todas as moléculas forma submetidas em plataformas computacionais para avaliar parâmetros farmacocinéticos. A plataforma computacional *Molinspiration* (https://www.molinspiration.com/) permitiu selecionar moléculas com perfil para boa disponibilidade oral de acordo com a "Regra dos cinco de Lipinsk". Além da biodisponibilidade oral, as moléculas também foram estudadas para outros parâmetros farmacocinéticos e toxicológicos. As plataformas computacionais *Swiss ADME* (SwissADME) e *ADMETlab* (https://admet.scbdd.com/) foram utilizadas de modo que as moléculas submetidas em tais plataforma pudessem ter os parâmetros calculados. As moléculas que não apresentaram bons parâmetros farmacocinéticos e toxicológicos foram excluídas deste estudo, uma vez que tal estudo tem como objetivo as moléculas mais promissoras.

A plataforma *Molinspiration* também permite que as moléculas introduzidas possam ser avaliadas quanto a capacidade de inibição de quinases. Tal resultado, também pode ser apresentado como capacidade de uma molécula apresentar-se bioativa. Todas as moléculas foram introduzidas nesta plataforma para realização deste cálculo.

A plataforma *ADMETlab* permitiu calcular, além de outras propriedades farmacocinéticas, a capacidade das moléculas deste estudo em atravessar a Barreira Hematoencefálica (BHE). As moléculas propostas foram introduzidas nesta plataforma e o cálculo para capacidade de atravessar a BHE foi então calculado.

Os cálculos para todas as 98 moléculas propostas neste estudo foram realizados. As plataformas computacionais utilizadas apresentam resultados para os cálculos como sendo uma probabilidade do resultado para cada parâmetro analisado que já foi realizado os mesmos parâmetros em testes experimentais. Assim, os resultados normalmente são expressos em números de probabilidade variando de 0,00 a 99,99. Quanto maior número, maior a probabilidade de o resultado reproduzir um teste experimental de uma fração de cada molécula que já foi realizado tal teste *in vitro*. Portanto, foi realizado os cálculos para todas as moléculas criando o *score* (moléculas mais promissoras > moléculas menos promissoras). Para isso, foi adotado pesos para os principais critérios deste estudo: capacidade de atravessar a BHE – peso 3, capacidade de ser inibidor de quinase - peso 2 e inibidor de enzima - peso 1.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O presente estudo permitiu selecionar 98 moléculas para serem avaliadas quanto à capacidade de serem sintetizadas. De acordo com o Esquema 1, todas as moléculas foram propostas variando substituições R e R1. Essa pré-seleção foi muito importante porque todas as moléculas propostas neste estudo tiveram sua rota sintética conhecida e passível de serem sintetizadas. As rotas sintéticas

propostas já foram realizadas com elevado índice de rendimento (CONNOLLY et al., *2005*). As moléculas propostas foram avaliadas quanto à capacidade de ter boa biodisponibilidade oral através da regra de cinco de Lipinski e outros parâmetros farmacocinéticos.

A tabela do anexo A mostra 98 moléculas (numeradas de 1 a 98) que foram estudadas sendo avaliadas seus perfis farmacocinéticos *in silico*. De acordo com os cálculos realizados neste estudo em relação à violação da regra de cinco de Lipinski as moléculas 5, 7, 8, 10, 14, 15,16,18,25,26,34,37,48,56,61,65,67,70,75,82,83,86,87 e 93 tiveram violações da regra. Dentre as moléculas com violação, apenas as moléculas 25,37,82 e 93 não apresentaram violação do requisito *LogP*, todas as demais violaram pelo menos um requisito desta regra, portanto, essa primeira abordagem permitiu excluir moléculas consideradas pobres em biodisponibilidade oral, ou seja, que provavelmente possuem má absorção. Alguns estudos computacionais usaram esses parâmetros como um filtro para selecionar moléculas mais promissoras em termos de biodisponibilidade oral (FERNANDES et al., 2015). Outras moléculas também foram excluídas deste estudo quando não foi permitido cálculo de um dos parâmetros estudados. Outros parâmetros farmacocinéticos também foram avaliados *in silico* (Anexo A) o que permitiu corroborar com a seleção das moléculas mais promissoras deste estudo. Estudos para o desenvolvimento de novos fármacos devem abordar parâmetros farmacocinéticos para excluir moléculas que não possam, por exemplo, ter boa absorção, distribuição, metabolismo, excreção e ser tóxica (ANTUNES e PEREIRA, 2019).

Os resultados para calcular a probabilidade de inibição de quinases e inibição de enzimas foram obtidos pelo uso da plataforma computacional *Molinspiration* (Anexo A). Tal plataforma utiliza fragmentos de moléculas que já foram testadas experimentalmente *in vitro* para criar um modelo de relação estrutura atividade (QSAR) calibrado e validado. Assim, quando novas moléculas propostas são inseridas neste modelo, o mesmo poderá predizer possibilidade de inibição das quinases e das enzimas baseando-se nesta relação QSAR (https://www.molinspiration.com/docu/midv/index.html).

A análise de inibição de quinase foi um dos critérios mais importante neste estudo. Tal parâmetro é importante, pois as enzimas quinases são responsáveis pela fosforilação de proteínas que podem ativar estímulos intracelulares e extracelulares importantes no controle da atividade dessas proteínas (SILVA *et al.*, 2009). Tais proteínas regulam diversas funções como o ciclo celular, proliferação, diferenciação, mobilidade e a sobrevivência ou morte celular. Para que essas enzimas sejam desreguladas, também há ativação através da fosforilação, porém ocorre uma ativação anormal por algum oncogênese e consequentemente essa proteína quinase desempenha sua função de modo a auxiliar na formação de tumores e crescimento de células cancerígenas, proliferando essas células em excesso, impedindo a apoptose, entre outros mecanismos. Através dessas informações diversas drogas estão sendo produzidas na intenção de inibir o local de ligação do ATP inibindo assim, por exemplo, a

cascata de sinalização, fazendo com que não ocorra a divisão celular (LOPES et al., 2009; AZEVEDO et al., 2017). Devido à relevância da capacidade dessas moléculas em inibir quinases e essas enzimas estarem relacionadas com câncer atribuiu-se a esse parâmetro um *peso 2* (Anexo C).

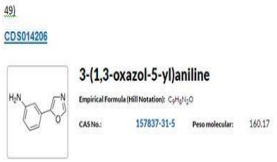
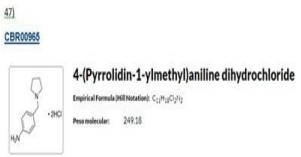
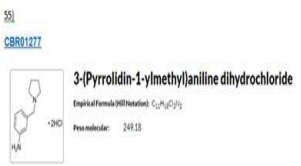
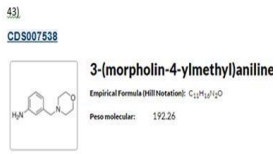
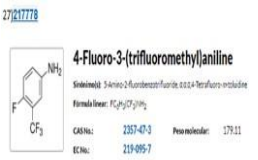
A probabilidade de cada molécula ser considerada um bom inibidor de enzimas também foi avaliada (Anexo C), mas como isso é um parâmetro bastante amplo em relação ao desenvolvimento de novos fármacos para tratamento de câncer, foi atribuído a este parâmetro *peso 1*. Existem algumas evidências em relação à inibição de enzimas ser importante para o tratamento de câncer, por exemplo, nos casos das enzimas β-glicuronidase e nitroredutase que quando tem sua produção diminuída pode ocasionar a hidrólise de compostos carcinogênicos diminuindo as substâncias nocivas (DENIPOTE et al., 2010). Alguns estudos também demonstram a importância de enzimas proteolíticas no processo de invasão tumoral (CAPELOZZI, 2009).

Um estudo da probabilidade de atravessar a Barreira Hematoencefálica pelas moléculas também foi avaliado *in silico* (Anexo B). Para realizar este estudo foi utilizado a plataforma *ADMETlab*. No presente estudo, uma molécula que tenha capacidade de atravessar a BHE é extremamente relevante. Assim, foi definido para esse parâmetro *peso 3*, uma vez que as moléculas mais promissoras deste estudo podem ser consideradas para tratamento de câncer cerebral. Nesse sentido, para que um fármaco tenha a ação desejada no local do tumor cerebral, é necessário que ele atravesse a BHE. Tal barreira tem como função impedir a passagem de macromoléculas, ela é uma estrutura que dificulta o acesso de substâncias do sangue para o sistema nervoso central assim como fármacos (VIEIRA e SOUSA, 2013).

A Tabela 1 mostra as cinco moléculas mais promissoras deste estudo. A classificação destas moléculas foi realizada considerando os três parâmetros mais importantes abordados: capacidade de atravessar a BHE que recebeu a denominação BBB do inglês *blood–brain barrier*; inibidor de quinase e inibidor de enzimas. Para cada um destes parâmetros foi atribuído *peso* 3, 2 e 1 respectivamente. Para cada molécula os valores destes parâmetros foram calculados e os resultados foram multiplicados pelo respectivo *peso* (Anexo C). Dessa forma, após a realização dos cálculos e multiplicações pelos respectivos *pesos* um valor final denominado "Nota total" foi obtido para cada molécula. Assim, as moléculas foram todas classificadas de acordo com a sua "Nota total" sendo que a molécula 49 obteve o maior valor, sendo, portanto, considerada a moléculas mais promissora deste estudo. Outras quatro moléculas 47, 55, 43 e 27 compõem o grupo das cinco melhores moléculas. Essas cinco moléculas mais promissoras podem apresentar bom perfil farmacocinético, boa biodisponibilidade oral, apresentam um alto potencial para inibir quinases e potencial capacidade de atravessar a BHE. As moléculas 47 e 43 apresentaram 93% de probabilidade de atravessarem a BHE, sendo considerado um resultado promissor para o desenvolvimento de uma molécula para câncer cerebral. Assim, este estudo

permitiu selecionar cinco moléculas mais promissoras para síntese e posterior testes *in vitro*, considerados etapas iniciais do desenvolvimento de novos fármacos.

Tabela 1: Classificação de moléculas promissoras.

Classificação	Moléculas	BBB	Inibidor de quinase	Inibidor de enzima	Nota total
1)Molécula 49		0,727x 3=2,181	0,94x 2=1,88	0,62x 1=0,62	4,681
2)Molécula 47		0,934x 3=2,802	0,67 x 2=1,34	0,26 x 1=0,26	4,402
3)Molécula 55		0,929x 3=2,787	0,67x 2=1,34	0,25x 1=0,25	4,377
4)Molécula 43		0,934x 3=2,802	0,66x 2=1,32	0,20x 1=0,20	4,322
5)Molécula 27		0,844x 3=2,532	0,74x 2=1,48	0,24x 1=0,24	4,255

Fonte: Elaborada pelo autor. (2025)

4 CONCLUSÃO

O uso de ferramentas computacionais tal como a bioinformática permitiu realizar um estudo de 98 moléculas candidatas à fármacos. As moléculas foram avaliadas em relação à parâmetros considerados importantes neste estudo. Após a realização deste estudo pode-se propor cinco moléculas mais promissoras para síntese e futuro testes *in vitro*. Tal resultado pode ser considerado uma etapa importante para desenvolvimento de novos fármacos para o tratamento do câncer cerebral.

REFERÊNCIAS

ANDRADE, EL et al. Estudos não clínicos necessários para o desenvolvimento de novos medicamentos - Parte I: estudos iniciais in silico e in vitro, descoberta e validação de novos alvos, comprovação de princípios e robustez de estudos em animais. **Revista Brasileira de Pesquisas Médicas e Biológicas** , v. 49, 2016.

ANTUNES, Joao Eustaquio; DE MOURA PEREIRA, Michelle Bueno. Rational Computational Study for New Kinase Inhibitors. **Journal of Drug Design and Medicinal Chemistry**, v. 5, n. 3, p. 40-46, 2019.

AZEVEDO, Liviane D. de et al. Sínteses e propriedades de fármacos inibidores da tirosina quinase BCR-ABL, utilizados no tratamento da leucemia mieloide crônica. **Química Nova**, v. 40, p. 791-809, 2017.

BAIN, Jenny et al. The selectivity of protein kinase inhibitors: a further update. **Biochemical Journal**, v. 408, n. 3, p. 297-315, 2007.

BANKS, William A. The blood–brain barrier as a regulatory interface in the gut–brain axes. **Physiology & behavior**, v. 89, n. 4, p. 472-476, 2006.

BANKS, William A.; ERICKSON, Michelle A. The blood–brain barrier and immune function and dysfunction. **Neurobiology of disease**, v. 37, n. 1, p. 26-32, 2010.

BARREIRO, Eliezer J. Estratégia de simplificação molecular no planejamento racional de fármacos: a descoberta de novo agente cardioativo. **Química nova**, v. 25, p. 1172-1180, 2002.

BARREIRO, Eliezer J.; FRAGA, Carlos Alberto Manssour. **Química Medicinal-: As bases moleculares da ação dos fármacos**. Artmed Editora, 2014.

SILVA, Bárbara V. et al. Proteínas quinases: características estruturais e inibidores químicos. **Química nova**, v. 32, n. 2, p. 453-462, 2009.

BEGLEY, David J.; BRIGHTMAN, Milton W. Structural and functional aspects of the blood-brain barrier. **Peptide transport and delivery into the central nervous system**, p. 39-78, 2003.

CAPELOZZI, Vera Luiza. Papel da imuno-histoquímica no diagnóstico do câncer de pulmão. **Jornal Brasileiro de Pneumologia**, v. 35, p. 375-382, 2009.

CONNOLLY, Terrence J.; MCGARRY, Patrick; SUKHTANKAR, Sunil. An eco-efficient pilot plant scale synthesis of two 5-substituted-6, 7-dimethoxy-1-H-quinazoline-2, 4-diones. **Green Chemistry**, v. 7, n. 8, p. 586-589, 2005.

DE DEUS VIEIRA, Gabriel; DE SOUSA, Camila Maciel. Aspectos celulares e fisiológicos da Barreira Hematoencefálica. **Journal of Health & Biological Sciences**, v. 1, n. 4, p. 166, 2013.

DENIPOTE, Fabiana Gouveia; TRINDADE, Erasmo Benício Santos de Moraes; BURINI, Roberto Carlos. Probióticos e prebióticos na atenção primária ao câncer de cólon. **Arquivos de Gastroenterologia**, v. 47, p. 93-98, 2010.

DOS SANTOS PINHEIRO, Renata Batista et al. Análise in silico do perfil farmacocinético e toxicológico do complexo tioglicolato de Zinco II [Zn (ATG) 2 (OH2) 2]. **Research, Society and Development**, v. 11, n. 6, p. e44711629430-e44711629430, 2022.

FERNANDES, Gabriela Souza et al. In Silico Pharmacokinetics Studies for Quinazolines Proposed as EGFR Inhibitors. **Open Journal of Medicinal Chemistry**, v. 5, n. 04, p. 106, 2015.

FRY, David W. et al. A specific inhibitor of the epidermal growth factor receptor tyrosine kinase. **Science**, v. 265, n. 5175, p. 1093-1095, 1994.

GOLAN, David et al. Princípios de farmacologia: a base fisiopatológica da farmacoterapia. In: **Princípios de farmacologia: a base fisiopatológica da farmacoterapia**. 2009

GUIDO, Rafael VC; ANDRICOPULO, Adriano D.; OLIVA, Glaucius. Planejamento de fármacos, biotecnologia e química medicinal: aplicações em doenças infecciosas. **Estudos avançados**, v. 24, p. 81-98, 2010.

HUGHES, James P. et al. Princípios da descoberta precoce de medicamentos. **Jornal britânico de farmacologia** , v. 162, n. 6, pág. 1239-1249, 2011.

LEVITZKI, Alexander; MISHANI, Eyal. Tyrphostins and other tyrosine kinase inhibitors. **Annual review of biochemistry**, v. 75, n. 1, p. 93-109, 2006.

LIANG, Xin et al. Molecular computing and bioinformatics. **Molecules**, v. 24, n. 13, p. 2358, 2019.

LOMBARDINO, Joseph G.; LOWE, John A. O papel do químico medicinal na descoberta de medicamentos - antes e agora. **Nature Reviews Drug Discovery** , v. 3, n. 10, pág. 853-862, 2004.

LOPES, Nei R.; ABREU, Maria Theresa CL. Inibidores de tirosino quinase na leucemia mielóide crônica. **Revista Brasileira de Hematologia e Hemoterapia**, v. 31, p. 449-453, 2009.

LUCENA, Rita de Cássia G. et al. Correlação clínico-topográfica em glioblastomas multiformes nas síndromes motoras: significados fisiopatológicos. **Arquivos de Neuro-Psiquiatria** , v. 64, p. 441-445, 2006.

MAH, James TL; LOW, Esther SH; LEE, Edmund. In silico SNP analysis and bioinformatics tools: a review of the state of the art to aid drug discovery. **Drug discovery today**, v. 16, n. 17-18, p. 800-809, 2011.

MIKOVSKI, Daniele et al. Química Medicinal E A Sua Importância No Desenvolvimento De Novos Fármacos. **Revista Saúde e Desenvolvimento**, v. 12, n. 13, p. 29-43, 2018.

Molinspiration Cheminformatics.
Disponível em: <https://www.molinspiration.com/>.

PATEL, Ronak Y.; DOERKSEN, Robert J. Protein kinase− inhibitor database: structural variability of and inhibitor interactions with the protein kinase P-loop. **Journal of proteome research**, v. 9, n. 9, p. 4433-4442, 2010.

REWCASTLE, G. W. et al. Synthesis of 4-(Phenylamino) pyrimidine Derivatives as ATP-Competitive Protein Kinase Inhibitors with Potential for Cancer Chemotherap. **Current Organic Chemistry**, v. 4, n. 7, p. 679-706, 2000.

ROJAS, Hugo; RITTER, Cristiane; PIZZOL, Felipe Dal. Mechanisms of dysfunction of the blood-brain barrier in critically ill patients: emphasis on the role of matrix metalloproteinases. **Revista Brasileira de terapia intensiva**, v. 23, p. 222-227, 2011.

ROSKOSKI JR, Robert. Properties of FDA-approved Small Molecule Protein Kinase Inhibitors: A 2023 Update. **Pharmacological research**, p. 106552, 2022.

SANTOS, Victória Laysna dos Anjos; GONSALVES, Arlan de Assis; ARAÚJO, Cleônia Roberta Melo. Abordagem didática para o desenvolvimento de moléculas bioativas: regra dos cinco de Lipinski e preparação de heterociclo 1, 3, 4-oxadiazol em forno de micro-ondas doméstico. **Química Nova**, v. 41, p. 110-115, 2018.

YANG, Yongliang; ADELSTEIN, S. James; KASSIS, Amin I. Descoberta de alvos a partir de abordagens de mineração de dados. **Descoberta de drogas hoje** , v. 17, p. S16-S23, 2012.

ANEXOS

ANEXO A - ESTUDO DAS MOLÉCULAS

Moléculas	Cálculos das propriedades moleculares	Cálculos das pontuações de bioatividade	Propriedades farmacocinéticas	Propriedades de toxicidade
1) Produto nº [illegible] 4-(4-Fluorophenoxy)aniline [illegible]	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5.00 TPSA 91.54 natoms 30 MW 406,42 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 351.24	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,13 Modulador de canal iônico -0,15 Inibidor de quinase 0,67 Ligante de receptor nuclear -0,29 Inibidor de protease -0,09 Inibidor de enzima 0,23	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -5.40 cm/s	[illegible]
2) [illegible] 4-(Tetrahydrofuran-2-ylmethoxy)aniline [illegible]	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3.51 TPSA 100.77 natoms 29 MW 396,45 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 7 volume 357,08	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,08 Modulador de canal iônico -0,35 Inibidor de quinase 0,40 Ligante de receptor nuclear -0,76 Inibidor de protease -0,38 Inibidor de enzima 0,08	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Sim Inibidor de CYP1A2 Sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Sim Inibidor de CYP2D6 Sim Inibidor de CYP3A4 Sim Log K_p (permeação da pele) -6.31 cm/s	[illegible]
3) [illegible] 2,6-Dichloro-4-(trifluoromethoxy)aniline [illegible]	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,86 TPSA 91,54 natoms 27 MW 425,19 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 311.20	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,13 Modulador de canal iônico -0,04 Inibidor de quinase 0,39 Ligante de receptor nuclear -0,29 Inibidor de protease -0,07 Inibidor de enzima 0.21	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 Não Log K_p (permeação da pele) -5.52 cm/s	Não foi possível alcular

3-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 1,92 TPSA 125,91 natoms 27 MW 364,37 não 10 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 310,22	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,04 Modulador de canal iônico -0,71 Inibidor de quinase 0,49 Ligante de receptor nuclear -0,94 Inibidor de protease -0,19 Inibidor de enzima 0,05	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp sim inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 Não inibidor de CYP2C9 Não inibidor de CYP2D6 Não inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -6.03 cm/s	---
3-(4-Chloro-3-ethylphenoxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 6.31 TPSA 91.54 natoms 32 MW 450,93 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 7 volume 393,20	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,11 Modulador de canal iônico -0,15 Inibidor de quinase 0,53 Ligante de receptor nuclear -0,50 Inibidor de protease -0,15 Inibidor de enzima 0,16 Obter dados como texto (para copiar/colar).	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -4.82 cm/s	---
4-(Trifluoromethyl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,97 TPSA 82,30 natoms 26 MW 564,33 não 6 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 297,21	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,18 Modulador de canal iônico -0,09 Inibidor de quinase 0,71 Ligante de receptor nuclear -0,54 Inibidor de protease -0,11 Inibidor de enzima 0,24 Obter dados como texto (para copiar/colar).	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -5.71 cm/s	---
4-(Trimethylsilylethynyl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5.21 TPSA 82.30 natoms 28 MW 392,54 não 6 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 4 volume 367,29	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,02 Modulador de canal iônico 0,49 Inibidor de quinase 0,90 Ligante de receptor nuclear -0,53 Inibidor de protease 0,28 Inibidor de enzima 0,65	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 Não inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 Não Log Kp (permeação da pele) -5.90 cm/s	Não foi possível alcular
4-(4-Bromophenoxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5.64 TPSA 91.54 natoms 30 MW 467,32 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 6 volume 364.19	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,04 Modulador de canal iônico -0,20 Inibidor de quinase 0,60 Ligante de receptor nuclear -0,61 Inibidor de protease -0,17 Inibidor de enzima 0,10 Obter dados como texto (para copiar/colar).	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -5.44 cm/s	---
4-(3-Methoxyphenoxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4,89 TPSA 100,77 natoms 31 MW 410,45 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 7 volume 371,85	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,12 Modulador de canal iônico -0,14 Inibidor de quinase 0,61 Ligante de receptor nuclear -0,49 Inibidor de protease -0,07 Inibidor de enzima 0,23 Obter dados como texto (para copiar/colar).	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -5.65 cm/s	---

4-(4-Chlorophenoxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5,51 TPSA 91,54 natoms 30 PM 422,87 não 7 nOHNH 3 violações 1 nrotb 6 volume 359,84	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,12 Modulador de canal iônico -0,14 Inibidor de quinase 0,63 Ligante de receptor nuclear -0,53 Inibidor de protease -0,10 Inibidor de enzima 0,21	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -5,21 cm/s	*** 1,994 - 1,492 --- 1,179 2,299 log mol/kg (142,778 mg/kg) > 500 mg/kg
1,5-Bis(trifluoromethyl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4,80 TPSA 82,10 natoms 30 PM 432,32 não 6 nOHNH 3 violações 0 nrotb 6 volume 328,51	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,16 Modulador de canal iônico -0,08 Inibidor de quinase 0,62 Ligante de receptor nuclear -0,46 Inibidor de protease -0,09 Inibidor de enzima 0,21	Baixa Não Não sim sim sim Não sim sim -5,54 cm/s	* 0,932 - 0,41 --- 0,148 2,264 log mol/kg (182,537 mg/kg) > 500 mg/kg
4-(Thiophen-3-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4,46 TPSA 82,30 natoms 27 PM 378,46 não 6 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 328,03	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,19 Modulador de canal iônico -0,09 Inibidor de quinase 0,85 Ligante de receptor nuclear -0,56 Inibidor de protease -0,07 Inibidor de enzima 0,31	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -5,54 cm/s	** 1,896 * 1,68 --- 1,139 2,302 log mol/kg (212,774 mg/kg) > 500 mg/kg
4-(Pyridin-3-yloxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,76 TPSA 106,43 natoms 29 PM 300,42 não 8 nOHNH 3 violações 0 nrotb 6 volume 342,15	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,22 Modulador de canal iônico -0,02 Inibidor de quinase 0,86 Ligante de receptor nuclear -0,52 Inibidor de protease -0,01 Inibidor de enzima 0,33	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -6,21 cm/s	** 0,8 ** 1,778 --- 0,21 2,236 log mol/kg (200,000 mg/kg) > 500 mg/kg
4-[(Phenylsulfanyl)methyl]aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5,11 TPSA 82,30 natoms 30 PM 418,52 não 6 nOHNH 3 violações 1 nrotb 7 volume 372,25	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,01 Modulador de canal iônico -0,15 Inibidor de quinase 0,46 Ligante de receptor nuclear -0,60 Inibidor de protease -0,12 Inibidor de enzima 0,19	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -5,28 cm/s	** 1,974 * 1,532 --- 1,127 2,250 log mol/kg (180,024 mg/kg) > 500 mg/kg
4-Heptadecafluoroethylaniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 6,30 TPSA 82,30 natoms 47 PM 714,38 nON 6 nOHNH 3 violações 2 nrotb 12 volume 481,77	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR -0,21 Modulador de canal iônico -1,03 Inibidor de quinase -0,34 Ligante de receptor nuclear -0,95 Inibidor de protease 0,03 Inibidor de enzima -0,34	absorção GI permeante BBB Substrato P-gp Inibidor de CYP1A2 Inibidor de CYP2C19 Inibidor de CYP2C9 Inibidor de CYP2D6 Inibidor de CYP3A4 Log K_p (permeação da pele) cm/s	Não foi possível alcular

4-(Trifluoromethylsulfonyl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5,58 TPSA 116,44 natoms 29 PM 428,39 não 8 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 6 volume 328,64	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,12 Modulador de canal iônico -0,13 Inibidor de quinase 0,48 Ligante de receptor nuclear -0,10 Inibidor de protease 0,04 Inibidor de enzima 0,33	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 Não inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log K$_p$ (permeação da pele) -6.46 cm/s	0.472 (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0.982 AMES (Mutagenicidade de Ames) --- 0.934 Skin Sens. (sensibilização da pele) --- 0.897 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.594 -log(mol/kg) (424.281 mg/kg) >500 mg/kg
3-(Difluoromethoxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,67 TPSA 91,54 natoms 26 PM 362,34 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 301,59	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR -0,03 Modulador de canal iônico -0,35 Inibidor de quinase 0,46 Ligante de receptor nuclear -0,03 Inibidor de protease -0,65 Inibidor de enzima 0,20	Não foi possível calcular	0.472 (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0.994 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0.944 Skin Sens. (sensibilização da pele) --- 0.897 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.389 -log(mol/kg) (1399.628 mg/kg) >500 mg/kg
4-(Hexyloxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5,58 TPSA 91,54 natoms 29 PM 396,49 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 10 volume 375,47	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,15 Modulador de canal iônico -0,17 Inibidor de quinase 0,56 Ligante de receptor nuclear -0,51 Inibidor de protease -0,09 Inibidor de enzima 0,25	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log K$_p$ (permeação da pele) -4.94 cm/s	0.472 (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0.990 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0.936 Skin Sens. (sensibilização da pele) --- 0.928 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.5 -log(mol/kg) (1000.0 mg/kg) >500 mg/kg
4-(Trifluoromethoxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4.05 TPSA 91.54 natoms 27 PM 380,33 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 306,20	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,17 Modulador de canal iônico -0,04 Inibidor de quinase 0,62 Ligante de receptor nuclear -0,47 Inibidor de protease -0,03 Inibidor de enzima 0,24	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log K$_p$ (permeação da pele) -5.05 cm/s	0.472 (Hepatotoxicidade Humana) - 0.932 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0.956 Skin Sens. (sensibilização da pele) --- 0.928 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.997 -log(mol/kg) (1000.0 mg/kg) >500 mg/kg
4-(Thiophen-2-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4.46 TPSA 82.30 natoms 27 PM 378,46 não 6 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 328,83	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,19 Modulador de canal iônico -0,09 Inibidor de quinase 0,85 Ligante de receptor nuclear -0,56 Inibidor de protease -0,07 Inibidor de enzima 0,31	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp sim inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log K$_p$ (permeação da pele) -5.54 cm/s	0.472 (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0.939 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0.9 Skin Sens. (sensibilização da pele) --- 0.989 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.903 -log(mol/kg) (1012.7 mg/kg) >500 mg/kg
3-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3.46 TPSA 95.19 natoms 27 PM 379,44 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 323,88	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,16 Modulador de canal iônico -0,16 Inibidor de quinase 0,83 Ligante de receptor nuclear -0,66 Inibidor de protease -0,01 Inibidor de enzima 0,35	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim Log K$_p$ (permeação da pele) -5.00 cm/s	0.472 (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0.932 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0.942 Skin Sens. (sensibilização da pele) --- 0.932 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.839 -log(mol/kg) (1394.956 mg/kg) >500 mg/kg

4-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miloP 3.68 TPSA 95.19 natoms 27 PM 379,44 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 323,88	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,16 Modulador de canal iônico -0,16 Inibidor de quinase 0,01 Ligante de receptor nuclear -0,16 Inibidor de protease -0,01 Inibidor de enzima 0,31	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -5.00 cm/s	AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0.942 Sensibilização da pele --- 0.201 LD50 (Toxicidade aguda) 2.33 log mol/kg (1.04.02 mg/kg) > 500 mg/kg
4-(5H-Benzimidazol-1-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miloP 3.91 TPSA 100.13 natoms 31 PM 412,45 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 362,52	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,18 Modulador de canal iônico 0,01 Inibidor de quinase 0,74 Ligante de receptor nuclear -0,57 Inibidor de protease -0,06 Inibidor de enzima 0,24	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -5.34 cm/s	AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0.944 Sensibilização da pele --- 0.201 LD50 (Toxicidade aguda) 2.371 log mol/kg (307.01 mg/kg) > 500 mg/kg
2-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miloP 1,98 TPSA 125,91 natoms 27 PM 364,37 não 10 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 318,22	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,05 Modulador de canal iônico -0,01 Inibidor de quinase 0,47 Ligante de receptor nuclear -0,55 Inibidor de protease -0,18 Inibidor de enzima -0,02	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -6.58 cm/s	AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0.932 Sensibilização da pele --- 0.202 LD50 (Toxicidade aguda) 2.455 log mol/kg (284.07 mg/kg) > 500 mg/kg
4-(1H-Tetrazol-5-yloxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miloP -0,71 TPSA 148,49 natoms 28 PM 382,38 nON 11 nOHNH 6 nviolações 2 nrotb 6 volume 324,52	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,11 Modulador de canal iônico -0,17 Inibidor de quinase 0,66 Ligante de receptor nuclear -0,61 Inibidor de protease -0,08 Inibidor de enzima 0,23	absorção GI Baixa permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -8.08 cm/s	AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0.948 Sensibilização da pele --- 0.207 LD50 (Toxicidade aguda) 3.036 log mol/kg (102.27 mg/kg) > 500 mg/kg
3-Chloro-4-(4-chlorophenoxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miloP 6.12 TPSA 91.54 natoms 31 PM 457,32 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 6 volume 373,38	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,10 Modulador de canal iônico -0,24 Inibidor de quinase 0,64 Ligante de receptor nuclear -0,51 Inibidor de protease -0,16 Inibidor de enzima 0,28	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 Não Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -4.97 cm/s	AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0.892 Sensibilização da pele --- 0.294 LD50 (Toxicidade aguda) 3.177 log mol/kg (1.507.956 mg/kg) > 500 mg/kg
4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miloP 4.07 TPSA 82.30 natoms 27 PM 381,32 não 6 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 302,14	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,21 Modulador de canal iônico -0,10 Inibidor de quinase 0,74 Ligante de receptor nuclear -0,50 Inibidor de protease -0,11 Inibidor de enzima 0,24	Não foi possível calcular	AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0.454 Sensibilização da pele --- 0.112 LD50 (Toxicidade aguda) 2.450 log mol/kg (282.03 mg/kg) > 500 mg/kg

4-(2H-Benzimidazol-1-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,96 TPSA 108,13 natoms 32 MW 412,45 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 362,52	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,18 Modulador de canal iônico 0,01 Inibidor de quinase 0,74 Ligante de receptor nuclear -0,57 Inibidor de protease -0,06 Inibidor de enzima 0,24		
2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,96 TPSA 91,54 natoms 28 MW 394,35 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 322,76	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,17 Modulador de canal iônico -0,21 Inibidor de quinase 0,64 Ligante de receptor nuclear -0,60 Inibidor de protease -0,15 Inibidor de enzima 0,18		
4-Chloro-2-(trifluoromethyl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4,58 TPSA 82,30 natoms 27 MW 398,77 não 6 nOHNH 2 nviolações 0 nrotb 5 volume 318,75	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,12 Modulador de canal iônico -0,10 Inibidor de quinase 0,62 Ligante de receptor nuclear -0,57 Inibidor de protease -0,17 Inibidor de enzima 0,20		
4-(2-Pyrimidinyloxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,81 TPSA 117,32 natoms 29 MW 390,40 não 9 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 337,99	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,22 Modulador de canal iônico -0,21 Inibidor de quinase 0,80 Ligante de receptor nuclear -0,54 Inibidor de protease -0,06 Inibidor de enzima 0,34		
CBR01436 4-(Propyl	Motor de propriedade Molinspiro miLogP 4.39 TPSA 82.30 natoms 26 MW 370,48 não 6 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 7 volume 334,21	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,05 Modulador de canal iônico -0,30 Inibidor de quinase 0,45 Ligante de receptor nuclear -0,71 Inibidor de protease -0,14 Inibidor de enzima 0,20		
4-[(3-Methylpiperidin-4-yl)oxy]aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2,82 TPSA 94,77 natoms 30 MW 409,49 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 4 volume 377,44	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,26 Modulador de canal iônico -0,07 Inibidor de quinase 0,69 Ligante de receptor nuclear -0,59 Inibidor de protease 0,01 Inibidor de enzima 0,30		

4-(HEPTYLOXY)ANILINE	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 6.09 TPSA 91.54 natoms 30 MW 430,52 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 11 volume 392,27	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,15 Modulador de canal iônico -0,17 Inibidor de quinase 0,14 Ligante de receptor nuclear -0,50 Inibidor de protease -0,08 Inibidor de enzima 0,24	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 Não Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 Não Log K_p (permeação da pele) -4.64 cm/h	
2-(BENZYLTHIO)ANILINE	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5.00 TPSA 82.30 natoms 29 MW 404,50 não 6 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 355,45	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,15 Modulador de canal iônico -0,27 Inibidor de quinase 0,57 Ligante de receptor nuclear -0,66 Inibidor de protease -0,14 Inibidor de enzima 0,28	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -5.16 cm/h	
3-5-Methyl-5H-tetrazol-1-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2.01 TPSA 125.91 natoms 28 MW 378,40 não 10 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 326,78	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,08 Modulador de canal iônico -0,54 Inibidor de quinase 0,36 Ligante de receptor nuclear -0,99 Inibidor de protease -0,26 Inibidor de enzima 0,06	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -6.03 cm/h	
3-Methoxy-5-(5H-tetrazol-1-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2.14 TPSA 135.15 natoms 29 MW 394,39 nON 11 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 6 volume 335,77	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,02 Modulador de canal iônico -0,70 Inibidor de quinase 0,45 Ligante de receptor nuclear -0,87 Inibidor de protease -0,20 Inibidor de enzima 0,03	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -7.20 cm/h	
4-(2-Morpholin-4-yl-2-oxoethoxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2.33 TPSA 121.88 natoms 32 MW 439,47 não 10 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 7 volume 388,82	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,06 Modulador de canal iônico -0,30 Inibidor de quinase 0,45 Ligante de receptor nuclear -0,69 Inibidor de protease -0,11 Inibidor de enzima 0,06	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 Não Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -7.40 cm/h	

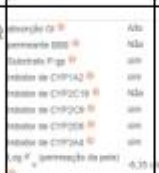
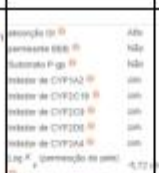
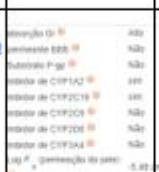
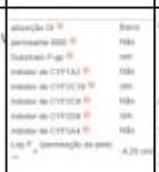
2-Methyl-3-(2H-pyrrol-3-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3.90 TPSA 87.24 natoms 20 MW 175,43 não 7 nOHNH 2 violações 0 nrotb 5 volume 339,25	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,08 Modulador de canal iônico -0,12 Inibidor de quinase 0,15 Ligante de receptor nuclear -0,04 Inibidor de protease -0,28 Inibidor de enzima 0,11	GI absorption High BBB permeant No P-gp substrate No CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor Yes CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes Log K_p (skin permeation) -5.91 cm/s	[illegible]
2-Methyl-5-(2H-tetrazol-1-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2.32 TPSA 126.91 natoms 20 MW 178,48 não 10 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 326,78	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR -0,01 Modulador de canal iônico -0,73 Inibidor de quinase 0,45 Ligante de receptor nuclear -0,91 Inibidor de protease -0,24 Inibidor de enzima 0,01	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -6.71 cm/s	[illegible]
3-(2,5-Dimethyl-1H-pyrrol-1-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,97 TPSA 87,24 natoms 23 MW 369,46 não 7 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 355,81	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,05 Modulador de canal iônico -0,34 Inibidor de quinase 0,45 Ligante de receptor nuclear -0,08 Inibidor de protease -0,29 Inibidor de enzima 0,02	absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -5.60 cm/s	[illegible]
4-(3-Methyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2.84 TPSA 121.21 natoms 20 MW 178,19 não 9 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 317,14	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,16 Modulador de canal iônico -0,11 Inibidor de quinase 0,55 Ligante de receptor nuclear -0,56 Inibidor de protease -0,16 Inibidor de enzima 0,22	GI absorption High BBB permeant No P-gp substrate No CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor No CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes Log K_p (skin permeation) -6.27 cm/s	[illegible]
3-(morpholin-4-ylmethyl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.1[illegible] miLogP 2.71 TPSA 54.77 natoms 23 MW 195,66 não 8 nOHNH 3 violações 0 nrotb 4 volume 360,85	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,15 Modulador de canal iônico -0,38 Inibidor de quinase 0,66 Ligante de receptor nuclear -0,08 Inibidor de protease -0,08 Inibidor de enzima 0,28	GI absorption High BBB permeant No P-gp substrate Yes CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor No CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes Log K_p (skin permeation) -6.36 cm/s	[illegible]

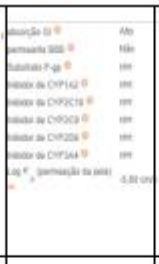
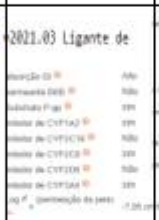
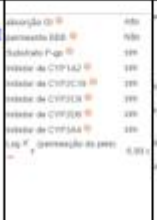
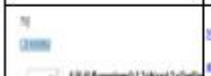
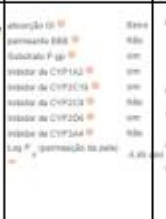
4-(2-Furyl)aniline hydrochloride	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4.02 TPSA 95.44 natoms 27 MW 362,39 não 7 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 318,89	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,08 Modulador de canal iônico -0,30 Inibidor de quinase 0,60 Ligante de receptor nuclear -0,74 Inibidor de protease -0,27 Inibidor de enzima 0,16	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 Não Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 Não Log K_p (permeação da pele) -5,00 cm/s	
3-(5-Methyl	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2.91 TPSA 125.91 natoms 28 MW 370,40 não 10 nOHNH 5 violações 0 nrotb 5 volume 326,70	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,08 Modulador de canal iônico -0,54 Inibidor de quinase 0,36 Ligante de receptor nuclear -0,99 Inibidor de protease -0,26 Inibidor de enzima 0,06	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 Não Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 Não Log K_p (permeação da pele) -6,60 cm/s	
3-[1-piperidinylcarbonyl]aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2.93 TPSA 102.61 natoms 30 MW 407,47 não 8 nOHNH 2 violações 0 nrotb 5 volume 370,05	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,18 Modulador de canal iônico -0,19 Inibidor de quinase 0,57 Ligante de receptor nuclear -0,67 Inibidor de protease -0,05 Inibidor de enzima 0,20	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 Não Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 Não Log K_p (permeação da pele) -6,43 cm/s	
4-Pyridide 5-yl-methylaniline dihydrochloride	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3.29 TPSA 85.94 natoms 28 MW 379,46 não 7 nOHNH 3 violações 0 nrotb 6 volume 351,87	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,23 Modulador de canal iônico -0,11 Inibidor de quinase 0,67 Ligante de receptor nuclear -0,65 Inibidor de protease 0,01 Inibidor de enzima 0,26	GI absorption High BBB permeant No P-gp substrate Yes CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor No CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes Log K_p (skin permeation) -4,25 cm/s	
1-[5-(4-Methoxyphenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl]aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4.10 TPSA 121.23 natoms 35 MW 409,35 nON 9 nOHNH 3 violations 2 nrotb 6 volume 409,86	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,01 Modulador de canal iônico -0,37 Inibidor de quinase 0,41 Ligante de receptor nuclear -0,66 Inibidor de protease -0,13 Inibidor de enzima 0,19	GI absorption Low BBB permeant No P-gp substrate No CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor No CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes Log K_p (skin permeation) -5,56 cm/s	

8 CHEMBL 3-[1,2,4-oxazol-5-yl]aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 1,16 TPSA 108,91 natoms 27 MW 363,38 não 8 nOHNH 5 violações 0 nrotb 5 volume 314,73	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,22 Modulador de canal iônico -0,10 Inibidor de quinase 0,94 Ligante de receptor nuclear -0,18 Inibidor de protease -0,13 Inibidor de enzima 0,62	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -6,32 cm/s	[illegible]
9 CHEMBL 2-Fluoro-5-(4H-1,2,4-triazol-4-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2,18 TPSA 113,02 natoms 28 MW 381,37 não 9 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 319,31	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,11 Modulador de canal iônico -0,20 Inibidor de quinase 0,55 Ligante de receptor nuclear -0,06 Inibidor de protease -0,20 Inibidor de enzima 0,06	GI absorption High BBB permeant No P-gp substrate Yes CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor No CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes Log K_p (skin permeation) -7,21 cm/s	[illegible]
10 CHEMBL 5-Chloro-2-(5H-1,2,4-triazol-5-yl)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2,69 TPSA 113,02 natoms 28 MW 397,83 não 9 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 327,91	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,07 Modulador de canal iônico -0,19 Inibidor de quinase 0,54 Ligante de receptor nuclear -0,06 Inibidor de protease -0,18 Inibidor de enzima 0,01	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -6,31 cm/s	[illegible]
11 CHEMBL 2-[2-(2-Pyridinyl)ethyl]aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,84 TPSA 95,19 natoms 30 MW 401,47 não 7 nOHNH 3 violações 0 nrotb 7 volume 366,77	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,27 Modulador de canal iônico -0,02 Inibidor de quinase 0,74 Ligante de receptor nuclear -0,49 Inibidor de protease -0,04 Inibidor de enzima 0,36	absorção GI Alta permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -5,77 cm/s	[illegible]
12 CHEMBL 2-Chloro-4-(3-fluorobenzyloxy)aniline	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,84 TPSA 95,19 natoms 30 MW 401,47 não 7 nOHNH 3 violações 0 nrotb 7 volume 366,77	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,27 Modulador de canal iônico -0,02 Inibidor de quinase 0,74 Ligante de receptor nuclear -0,49 Inibidor de protease -0,04 Inibidor de enzima 0,39	GI absorption High BBB permeant No P-gp substrate No CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor Yes CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes Log K_p (skin permeation) -5,52 cm/s	[illegible]

3-(4-methylpiperazin-1-yl)aniline	Fator de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,85 TPSA 88,78 natoms 29 PM 394,48 não 0 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 364,01	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante da GPCR 0,12 Modulador de canal iônico -0,11 Inibidor de quinase 0,70 Ligante de receptor nuclear -0,75 Inibidor de protease -0,13 Inibidor de enzima 0,19	absorção GI Alto permeante BHB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -6,61 cm/s	
3-Pyrrolidin-1-ylmethylaniline dihydrochloride	Fator de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 1,26 TPSA 85,54 natoms 20 PM 379,46 não 7 nOHNH 3 violações 0 nrotb 6 volume 351,87	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,23 Modulador de canal iônico -0,12 Inibidor de quinase 0,67 Ligante de receptor nuclear -0,66 Inibidor de protease 0,01 Inibidor de enzima 0,25	absorção GI Alto permeante BHB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 Não Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -4,25 cm/s	
3-chloro-4-(3-fluorobenzyloxy)aniline	Fator de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 5,48 TPSA 91,54 natoms 22 PM 454,89 não 7 nOHNH 3 violações 1 nrotb 7 volume 381,58	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,09 Modulador de canal iônico -0,19 Inibidor de quinase 0,58 Ligante de receptor nuclear -0,48 Inibidor de protease -0,17 Inibidor de enzima 0,15	absorção GI Alto permeante BHB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -5,35 cm/s	
4-(1,2,3-thiadiazol-4-yl)aniline	Fator de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 3,34 TPSA 108,89 natoms 17 PM 300,43 não 0 nOHNH 3 violações 0 nrotb 5 volume 319,72	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,21 Modulador de canal iônico -0,47 Inibidor de quinase 0,07 Ligante de receptor nuclear -0,58 Inibidor de protease -0,07 Inibidor de enzima 0,47	GI absorção Low BBB permeant No P-gp substrate No CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor No CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes Log Kp (skin permeation) -5,30 cm/s	
3-(4-Methyl-1H-imidazol-1-yl)-5-trifluoromethylaniline	Fator de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 4,09 TPSA 100,13 natoms 23 PM 458,44 não 0 nOHNH 3 violações 0 nrotb 7 volume 383,19	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante da GPCR 0,31 Modulador de canal iônico 0,00 Inibidor de quinase 0,49 Ligante de receptor nuclear -0,50 Inibidor de protease 0,01 Inibidor de enzima 0,40	absorção GI Baixo permeante BHB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log Kp (permeação da pele) -5,30 cm/s	

	Motor de propriedade Molinspiration v2021.10 miLogP 2.40 TPSA 100.13 natoms 27 MW 362,39 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 308,53	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,20 Modulador de canal iônico -0,10 Inibidor de quinase 0,38 Ligante de receptor nuclear -0,09 Inibidor de protease 0,12 Inibidor de enzima 0,35		
	Motor de propriedade Molinspirati miLogP 3.10 TPSA 100.77 natoms 28 MW 382,42 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 340,27	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR -0,06 Modulador de canal iônico 0,20 Inibidor de quinase 0,52 Ligante de receptor nuclear -0,75 Inibidor de protease -0,15 Inibidor de enzima 0,29		
	Motor de propriedade Molinspiration v202 miLogP 0.60 TPSA 91.54 natoms 39 MW 528,58 nON 7 nOHNH 3 nviolations 2 nrotb 10 volume 512.28	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,19 Modulador de canal iônico -0,22 Inibidor de quinase 0,45 Ligante de receptor nuclear -0,21 Inibidor de protease -0,11 Inibidor de enzima 0,23		
	Motor de propriedade Molinspirat miLogP 2.04 TPSA 125.91 natoms 28 MW 382,36 não 10 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 315,15	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v GPCR -0,01 Modulador de canal iônico -0,76 Inibidor de quinase 0,51 Ligante de receptor nuclear -0,97 Inibidor de protease -0,20 Inibidor de enzima 0,01		
	Motor de propriedade Molinspirati miLogP 2.55 TPSA 125.91 natoms 28 MW 378,40 não 10 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 326,78	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.0 GPCR 0,29 Modulador de canal iônico -0,16 Inibidor de quinase 0,68 Ligante de receptor nuclear -0,81 Inibidor de protease -0,17 Inibidor de enzima 0,30		
	Motor de propriedade Molinspiration miLogP 3.40 TPSA 95.19 natoms 28 MW 393,47 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 340,44	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.0 GPCR 0,04 Modulador de canal iônico -0,27 Inibidor de quinase 0,61 Ligante de receptor nuclear -0,75 Inibidor de protease -0,21 Inibidor de enzima 0,19		

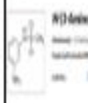
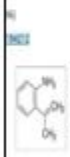
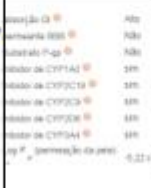
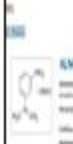
	Motor de propriedade Molinspir miLogP 5,89 TPSA 91,54 natoms 31 MW 436,90 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 6 volume 376,48	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.0 GPCR 0,10 Modulador de canal iônico -0,31 Inibidor de quinase 0,55 Ligante de receptor nuclear -0,62 Inibidor de protease -0,20 Inibidor de enzima 0,13		
	Motor de propriedade Molinspiration miLogP 2.09 TPSA 100.13 natoms 28 MW 370,42 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 336,09	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2 GPCR 0,26 Modulador de canal iônico -0,23 Inibidor de quinase 0,69 Ligante de receptor nuclear -0,77 Inibidor de protease -0,10 Inibidor de enzima 0,29		
	Motor de propriedade Molinspirati miLogP 5.41 TPSA 85.54 natoms 31 MW 441,96 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 5 volume 398,57	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2 GPCR 0,12 Modulador de canal iônico -0,23 Inibidor de quinase 0,46 Ligante de receptor nuclear -0,67 Inibidor de protease -0,23 Inibidor de enzima 0,06		
	Motor de propriedade Molinspir miLogP 4.29 TPSA 95.19 natoms 30 MW 399,45 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 360,58	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,24 Modulador de canal iônico -0,04 Inibidor de quinase 0,75 Ligante de receptor nuclear -0,53 Inibidor de protease -0,05 Inibidor de enzima 0,33		
	Motor de propriedade Molinspiration miLogP 3.30 TPSA 115.98 natoms 35 MW 472,57 não 8 nOHNH 5 nviolações 0 nrotb 7 volume 435,87	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,08 Modulador de canal iônico -0,25 Inibidor de quinase 0,38 Ligante de receptor nuclear -0,56 Inibidor de protease -0,01 Inibidor de enzima 0,22		
	Motor de propriedade Molinspi miLogP 7.67 TPSA 108.77 natoms 39 MW 538,67 nON 8 nOHNH 3 nviolations 2 nrotb 11 volume 504.71	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,18 Modulador de canal iônico -0,27 Inibidor de quinase 0,38 Ligante de receptor nuclear -0,37 Inibidor de protease -0,18 Inibidor de enzima 0,12		

	Motor de propriedade Molinspir miLogP 3.77 TPSA 95.19 natoms 30 MW 401,47 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 7 volume 366,77	Pontuação da bioatividade de Molinspiration GPCR 0,20 Modulador de canal iônico -0,06 Inibidor de quinase 0,69 Ligante de receptor nuclear -0,55 Inibidor de protease -0,04 Inibidor de enzima 0,31		
	Motor de propriedade Molinspir miLogP 2.72 TPSA 113.02 natoms 28 MW 377,41 não 9 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 338,94	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,03 Modulador de canal iônico -0,36 Inibidor de quinase 0,45 Ligante de receptor nuclear -0,78 Inibidor de protease -0,38 Inibidor de enzima 0,17	+2021.03 Ligante de 	
	Motor de propriedade Molinspirat miLogP 3.77 TPSA 95.19 natoms 30 MW 401,47 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 7 volume 366,77	Pontuação de bioatividade de Molinspiratio GPCR 0,20 Modulador de canal iônico -0,06 Inibidor de quinase 0,69 Ligante de receptor nuclear -0,55 Inibidor de protease -0,04 Inibidor de enzima 0,31		
	Motor de propriedade Molinspira miLogP 4.29 TPSA 95.19 natoms 30 MW 399,45 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 360,58	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v GPCR 0,24 Modulador de canal iônico -0,04 Inibidor de quinase 0,75 Ligante de receptor nuclear -0,53 Inibidor de protease -0,05 Inibidor de enzima 0,33		
	Motor de propriedade Molinspirat miLogP 5.46 TPSA 106.19 natoms 33 MW 459,51 não 7 nOHNH 4 nviolações 1 nrotb 5 volume 382,69	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,06 Modulador de canal iônico -0,17 Inibidor de quinase 0,63 Ligante de receptor nuclear -0,51 Inibidor de protease -0,20 Inibidor de enzima 0,20		
	Motor de propriedade Molinspira miLogP 3,38 TPSA 96,53 natoms 28 MW 379,46 não 7 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 6 volume 351,14	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,33 Modulador de canal iônico -0,03 Inibidor de quinase 0,69 Ligante de receptor nuclear -0,50 Inibidor de protease 0,04 Inibidor de enzima 0,33		

	Motor de propriedade Molinspirat miLogP 4.21 TPSA 110.60 natoms 31 PM 412,45 não 8 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 4 volume 361,56	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.07 GPCR 0,15 Modulador de canal iônico -0,06 Inibidor de quinase 0,75 Ligante de receptor nuclear -0,91 Inibidor de protease -0,37 Inibidor de enzima 0,19	Não foi possível calcular	
	Motor de propriedade Molinspira miLogP 3,88 TPSA 96,53 natoms 27 PM 385,86 não 7 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 6 volume 331,07	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,18 Modulador de canal iônico -0,19 Inibidor de quinase 0,67 Ligante de receptor nuclear -0,77 Inibidor de protease -0,25 Inibidor de enzima 0,21		
	Motor de propriedade Molinspirat miLogP 0,49 TPSA 110,10 natoms 31 PM 415,48 não 8 nOHNH 5 nviolações 0 nrotb 4 volume 370,88	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2 GPCR 0,21 Modulador de canal iônico -0,81 Inibidor de quinase 0,53 Ligante de receptor nuclear -0,48 Inibidor de protease -0,20 Inibidor de enzima 0,28		
	Motor de propriedade Molinspira miLogP 4.00 TPSA 105.77 natoms 30 PM 474,36 não 8 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 7 volume 378,01	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,18 Modulador do canal iônico -0,25 Inibidor de quinase 0,63 Ligante do receptor nuclear -0,60 Inibidor de protease -0,17 Inibidor de enzima 0,16		
	Motor de propriedade Molinspira miLogP 0,63 TPSA 134,87 natoms 21 PM 287,28 não 9 nOHNH 5 nviolações 0 nrotb 3 volume 241,62	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR -0,83 Modulador de canal iônico -0,40 Inibidor de quinase 0,67 Ligante de receptor nuclear -1,24 Inibidor de protease -0,42 Inibidor de enzima 0,24		
	Motor de propriedade Molinspirat miLogP 4.52 TPSA 145.35 natoms 33 PM 462,90 não 9 nOHNH 6 nviolações 1 nrotb 4 volume 382,58	Pontuação de bioatividade de Molinspiration Ligante de GPCR -0,10 Modulador de canal iônico -0,1 Inibidor de quinase 0,40 Ligante de receptor nuclear -0,44 Inibidor de protease -0,42 Inibidor de enzima 0,18		

	Motor de propriedade Molinspira miLogP 7.33 TPSA 95.19 natoms 34 MW 441,32 nON 7 nOHNH 3 nviolações 2 nrotb 5 volume 420,10	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR -0,12 Modulador de canal iônico -0,48 Inibidor de quinase 0,49 Ligante de receptor nuclear -0,73 Inibidor de protease -0,35 Inibidor de enzima 0,06		
4-Aminobenzyl alcohol	Motor de propriedade Molinspi miLogP 2.42 TPSA 182.53 natoms 24 MW 326,36 não 7 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 5 volume 298,73	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,23 Modulador de canal iônico -0,10 Inibidor de quinase 0,78 Ligante de receptor nuclear -0,61 Inibidor de protease -0,00 Inibidor de enzima 0,40		
2-Morpholinoaniline	Motor de propriedade Molinspi miLogP 2,98 TPSA 94,77 natoms 28 MW 381,44 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 344,05	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,12 Modulador de canal iônico -0,29 Inibidor de quinase 0,66 Ligante de receptor nuclear -0,81 Inibidor de protease -0,21 Inibidor de enzima 0,18		
Disperse Orange 3	Motor de propriedade Molinspi miLogP 5.23 TPSA 152.85 natoms 33 MW 445,44 nON 11 nOHNH 3 nviolações 2 nrotb 7 volume 379,76	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.01 Ligante d GPCR -0,81 Modulador de canal iônico -0,16 Inibidor de quinase Ligante de receptor nuclear -0,84 Inibidor de protease -0,12 Inibidor de enzima 0,12		
4-Amino-4'-nitrodiphenyl sulfide	Motor de propriedade Molinspira miLogP 5.00 TPSA 128.13 natoms 32 MW 449,49 não 9 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 7 volume 378,79	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,02 Modulador de canal iônico -0,23 Inibidor de quinase 0,43 Ligante de receptor nuclear -0,60 Inibidor de protease -0,19 Inibidor de enzima 0,17		
4-Aminophenyl propargyl ether	Motor de propriedade Molinspira miLogP 3.29 TPSA 91.54 natoms 26 MW 350,38 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 313,96	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,17 Modulador de canal iônico -0,29 Inibidor de quinase 0,62 Ligante de receptor nuclear -0,56 Inibidor de protease -0,11 Inibidor de enzima 0,17		

281817 Sulfanilic A	Motor de propriedade Molinspira miLogP 0,07 TPSA 136,67 natoms 26 PM 376,39 não 9 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 5 volume 305,36	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,22 Modulador de canal iônico -0,09 Inibidor de quinase 0,55 Ligante de receptor nuclear -0,93 Inibidor de protease 0,05 Inibidor de enzima 0,39		
N-N-Aminophenylpiperidine	Motor de propriedade Molinspira miLogP 4.09 TPSA 85.54 natoms 28 PM 379,46 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 351.87	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,19 Modulador de canal iônico -0,13 Inibidor de quinase 0,64 Ligante de receptor nuclear -0,52 Inibidor de protease -0,09 Inibidor de enzima 0,23		
N-Boc-p-phenylenediamine	Motor de propriedade Molinspira miLogP 4.05 TPSA 112.80 natoms 30 PM 413,48 não 9 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 9 volume 379,27	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,14 Modulador de canal iônico -0,14 Inibidor de quinase 0,56 Ligante de receptor nuclear -0,57 Inibidor de protease -0,07 Inibidor de enzima 0,26		
N-Boc-m-phenylenediamin	Motor de propriedade Molinspira miLogP 4.03 TPSA 112.80 natoms 30 PM 413,48 não 9 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 9 volume 379,27	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,13 Modulador de canal iônico -0,16 Inibidor de quinase 0,57 Ligante de receptor nuclear -0,61 Inibidor de protease -0,08 Inibidor de enzima 0,25		
3-Aminophenylboronic acid pinacol ester	Motor de propriedade Molinspirat miLogP 2,85 TPSA 137,79 natoms 31 PM 423,28 não 9 nOHNH 6 nviolações 1 nrotb 4 volume 404,09	Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2 GPCR 0,17 Modulador de canal iônico -0,05 Inibidor de quinase 0,94 Ligante de receptor nuclear 0,07 Inibidor de protease 0,55 Inibidor de enzima 1,01 Obter dados como texto (para copiar/colar).		
1-(2-Aminophenyl)-1,4-hyrazolo	Motor de propriedade Molinspira miLogP 2.97 TPSA 108.13 natoms 27 PM 362,39 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 318,53	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,11 Modulador de canal iônico -0,19 Inibidor de quinase 0,60 Ligante de receptor nuclear -0,87 Inibidor de protease -0,22 Inibidor de enzima 0,04		

	Motor de propriedade Molinspira miLogP 2.29 TPSA 128.47 natoms 27 PM 389,44 não 9 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 6 volume 326,31	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,17 Modulador de canal iônico -0,08 Inibidor de quinase 0,65 Ligante de receptor nuclear -0,64 Inibidor de protease -0,80 Inibidor de enzima 0,26		
	Motor de propriedade Molinspira miLogP 3.76 TPSA 82.30 natoms 25 PM 336,39 não 6 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 310,21	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,18 Modulador de canal iônico -0,25 Inibidor de quinase 0,57 Ligante de receptor nuclear -0,47 Inibidor de protease -0,18 Inibidor de enzima 0,22		
	Motor de propriedade Molinspirati miLogP 3,88 TPSA 117,56 natoms 30 MW 403,44 não 8 nOHNH 5 nviolações 0 nrotb 6 volume 357,60	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,14 Modulador de canal iônico -0,11 Inibidor de quinase 0,69 Ligante de receptor nuclear -0,54 Inibidor de protease -0,04 Inibidor de enzima 0,27		
	Motor de propriedade Molinspira miLogP 3.16 TPSA 85.54 natoms 25 PM 339,40 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 311,82	Pontuação de bioatividade de Molinspiration GPCR 0,13 Modulador de canal iônico -0,22 Inibidor de quinase 0,73 Ligante de receptor nuclear -0,75 Inibidor de protease -0,17 Inibidor de enzima 0,23		

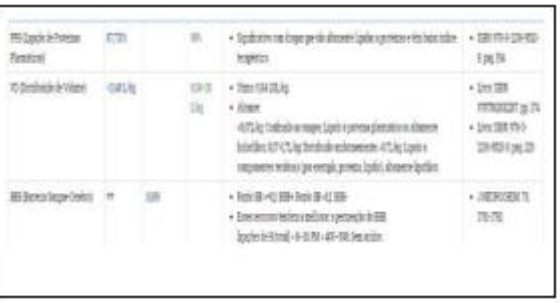
ANEXO B - CAPACIDADE DE ATRAVESSAR BARREIRA HEMATO-ENCEFÁLICA

1) Produto nº 695408

4-(4-Fluorophenoxy)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{10}FNO$

CAS No.: 36160-82-4 Peso molecular: 203.21



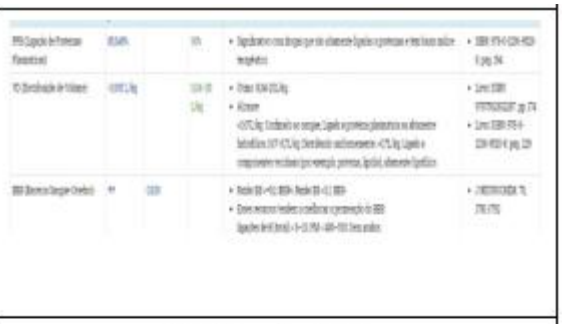
2)

CBR01220

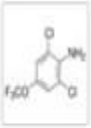
4-(Tetrahydrofuran-2-ylmethoxy)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{15}NO_2$

CAS No.: 91246-63-8 Peso molecular: 193.24



3)429899



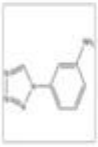
2,6-Dichloro-4-(trifluoromethoxy)aniline

Fórmula linear: $Cl_2C_6H_2(OCF_3)NH_2$

CAS No.: 99479-66-0 Peso molecular: 246.01

Não foi possível calcular

4) CBR01855



3-(1*H*-Tetrazol-1-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_7H_7N_5$

CAS No.: 14213-12-8 Peso molecular: 161.16

5)PH016744

3-(4-Chloro-3-ethylphenoxy)aniline

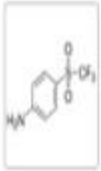
Fórmula linear: $C_{12}H_{12}ClNO$

CAS No.: 263266-18-8

5) 336599 **2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline** Sinónimo(s): 6-Methoxy-α,α,α-trifluoro-m-toluidine Fórmula linear: $CH_3OC_6H_3(CF_3)NH_2$ CAS No.: 349-65-5 Peso molecular: 191.15	
6) 224936 **4-(Trifluoromethyl)aniline** Sinónimo(s): 4-Aminobenzotrifluoride, α,α,α-Trifluoro-p-toluidine Fórmula linear: $CF_3C_6H_4NH_2$ CAS No.: 455-14-1 Peso molecular: 161.12 EC No.: 207-236-5 Beilstein No.: 1364853	
7)686360 **4-[(Trimethylsilyl)ethynyl]aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{15}NSi$ CAS No.: 75867-39-9 Peso molecular: 189.33 Comparar Nº do produto Descrição	Não foi possível calcular
8)695394 **4-(4-Bromophenoxy)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{10}BrNO$ CAS No.: 35465-35-7 Peso molecular: 264.12	
9)CBR01173 **4-(2-Methoxyphenoxy)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{13}NO_2$ CAS No.: 13066-01-8 Peso molecular: 215.25	

10)695386 **4-(4-Chlorophenoxy)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{10}ClNO$ CAS No.: 105-79-1 Peso molecular: 219.67 EC No.: 202-976-5	[illegible]
11)193135 **3,5-Bis(trifluoromethyl)aniline** Sinônimo(s): [illegible] Fórmula linear: [illegible] CAS No.: 328-74-5 Peso molecular: 229.12 EC No.: 206-330-0 Beilstein No.: [illegible]	[illegible]
12)650080 **4-(Thiophen-3-yl)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_9NS$ CAS No.: 834884-74-1 Peso molecular: 175.25	[illegible]
14)KOB0081 **4-[(Phenylsulfanyl)methyl]aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{13}NS$ CAS No.: 13738-70-0 Peso molecular: 215.31	[illegible]
15)28623 **4-(Heptadecafluorooctyl)aniline** Sinônimo(s): 4-Perfluorooctylaniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{14}H_6F_{17}N$ CAS No.: 83766-52-3 Peso molecular: 511.18	Não foi possível calcular

16)481920

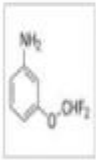


4-(Trifluoromethylsulfonyl)aniline

Formula linear: $CF_3SO_2C_6H_4NH_2$

CAS No.: 475-27-8 Peso molecular: 225.19

17)466446



3-(Difluoromethoxy)aniline

Formula linear: $CHF_2OC_6H_4NH_2$

CAS No.: 22236-08-4 Peso molecular: 159.13

18)222100

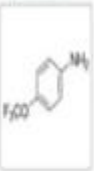
4-(Hexyloxy)aniline

Formula linear: $CH_3(CH_2)_5OC_6H_4NH_2$

CAS No.: 39905-57-2 Peso molecular: 193.29

EC No.: 254-696-8

19)237066



4-(Trifluoromethoxy)aniline

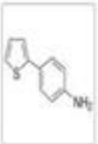
Sinónimo(s): 1,1,1-Trifluoro-p-anisidine

Formula linear: $CF_3OC_6H_4NH_2$

CAS No.: 461-82-5 Peso molecular: 177.12

EC No.: 207-317-5 Beilstein No.: 2090209

20)654558



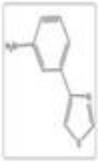
4-(Thiophen-2-yl)aniline

Sinónimo(s): 4-(2-Thienyl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_9NS$

CAS No.: 70010-48-9 Peso molecular: 175.25

21)CBR00146



3-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_8N_2S$

CAS No.: 134812-28-5 Peso molecular: 176.24

22)CBR00254

4-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_8N_2S$

CAS No.: 60759-10-6 Peso molecular: 176.24

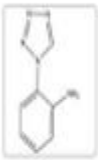
23)CBR00351

4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}N_3$

CAS No.: 52708-36-8 Peso molecular: 209.25

24) CBR00378

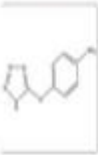


2-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_7H_7N_5$

CAS No.: 54210-51-6 Peso molecular: 161.16

25)CBR00260

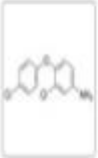


4-(1H-Tetrazol-5-yloxy)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_7H_7N_5O$

CAS No.: 467226-44-4 Peso molecular: 177.16

26) 561274



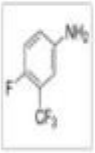
3-Chloro-4-(4-chlorophenoxy)aniline

Formula linear: $C_6H_3(NH_2)ClOC_6H_4Cl$

CAS No.: 24900-79-6 Peso molecular: 254.11

EC No.: 246-519-8

27) 217778



4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)aniline

Sinónimo(s): 5-Amino-2-fluorobenzotrifluoride, 2-Fluoro-5-trifluoromethylaniline

Formula linear: $FC_6H_3(CF_3)NH_2$

CAS No.: 2357-47-3 Peso molecular: 179.11

EC No.: 219-095-7

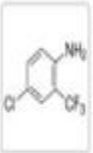
28) CBR00351

4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}N_3$

CAS No.: 52708-36-8 Peso molecular: 209.25

30) 217727



4-Chloro-2-(trifluoromethyl)aniline

Sinónimo(s): 4-Chloro-3,3,3-trifluoro-o-toluidine, 2-Amino-5-chlorobenzotrifluoride

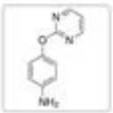
Formula linear: $ClC_6H_3(CF_3)NH_2$

CAS No.: 445-03-4 Peso molecular: 195.57

EC No.: 207-151-3

31)

CDS006360



4-(2-Pyrimidinyloxy)aniline

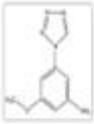
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_9N_3O$

Peso molecular: 187.20

32) CBR01435 4-(Propylthio)aniline hydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_{13}NS \cdot HCl$ Peso molecular: 203.73	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas) 97.20% 90% • Significativamente com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Distribuição de Volume) 0.077 L/kg 0.04–0.1 L/kg • Ottawa: 0.04–0.1 L/kg • Alcance: ~0.07 L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07–0.7 L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico. BBB (Barreira Sangue-Cérebro) ++ 0.07 • Pseudo BB: <0.1: BBB+. Pseudo BB: >0.1: BBB- • Essas variáveis tendem a modificar a permeação do BBB Ligações de H (total): 1–3. PSA: ~40–60 Å². Sem ácidos
33) CBR00634 4-[(1-Methylpiperidin-4-yl)oxy]aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{18}N_2O$ CAS No.: 358789-72-7 Peso molecular: 206.28	PPB (Plasma Protein Binding) 84.65 % 90% • Significativamente com drogas que são fortemente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Volume Distribution) 0.07 L/kg 0.04–0.1 L/kg • Optimal: 0.04–0.1 L/kg • Range: ~0.07 L/kg: Confined to blood, bound to plasma proteins or highly lipophilic. 0.07–0.7 L/kg: Evenly distributed. >0.7 L/kg: Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid) highly lipophilic. BBB (Blood–Brain Barrier) ++ 0.09 • BB ratio: >0.1: BBB+. BB ratio: <0.1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation H-bonds (total): 1–3. PSA: ~40–60 Å². No acids
34) T340006 4-(HEPTYLOXY)ANILINE Formula linear: $C_{13}H_{21}NO$ CAS No.: 39905-44-7 Peso molecular: 207.31	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas) 85.64% 90% • Significativamente com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Distribuição de Volume) 0.05 L/kg 0.04–0.1 L/kg • Ottawa: 0.04–0.1 L/kg • Alcance: ~0.07 L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07–0.7 L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico. BBB (Barreira Sangue-Cérebro) +++ 0.05 • Pseudo BB: <0.1: BBB+. Pseudo BB: >0.1: BBB- • Essas variáveis tendem a modificar a permeação do BBB Ligações de H (total): 1–3. PSA: ~40–60 Å². Sem ácidos
35) S704121 2-(BENZYLTHIO)ANILINE Formula linear: $C_{13}H_{13}NS$ CAS No.: 6325-92-4 Peso molecular: 215.319	PPB (Plasma Protein Binding) 95.77 % 90% • Significativamente com drogas que são fortemente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Volume Distribution) 0.02 L/kg 0.04–0.1 L/kg • Optimal: 0.04–0.1 L/kg • Range: ~0.07 L/kg: Confined to blood, bound to plasma proteins or highly lipophilic. 0.07–0.7 L/kg: Evenly distributed. >0.7 L/kg: Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid) highly lipophilic. BBB (Blood–Brain Barrier) + 0.48 • BB ratio: >0.1: BBB+. BB ratio: <0.1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation H-bonds (total): 1–3. PSA: ~40–60 Å². No acids
36) CBR00266 3-(5-Methyl-1H-tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_9N_5$ CAS No.: 500701-24-6 Peso molecular: 175.19	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas) 87.56% 90% • Significativamente com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Distribuição de Volume) 0.07 L/kg 0.04–0.1 L/kg • Ottawa: 0.04–0.1 L/kg • Alcance: ~0.07 L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07–0.7 L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico. BBB (Barreira Sangue-Cérebro) ++ 0.04 • Pseudo BB: <0.1: BBB+. Pseudo BB: >0.1: BBB- • Essas variáveis tendem a modificar a permeação do BBB Ligações de H (total): 1–3. PSA: ~40–60 Å². Sem ácidos

37)

CBR00344



3-Methoxy-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline

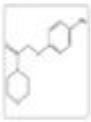
Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_9N_5O$

CAS No.: 883291-48-3 Peso molecular: 191.19

PPB (Plasma Protein Binding)	[illegible] %		90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index
VD (Volume Distribution)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Optimal: 0.04-20 L/kg • Range [illegible]
BBB (Blood–Brain Barrier)	**	[illegible]		• BB ratio >=1: BBB+; BB ratio <=1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation [illegible]

38)

CBR00087



4-(2-Morpholin-4-yl-2-oxoethoxy)aniline

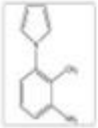
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{16}N_2O_3$

CAS No.: 74870-09-2 Peso molecular: 236.27

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	[illegible] %		90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance [illegible]
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	**	[illegible]		• Razão BB >=1: BBB+; Razão BB <=1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB [illegible]

39)

CBR00524



2-Methyl-3-(1H-pyrrol-1-yl)aniline

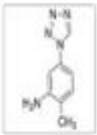
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{12}N_2$

CAS No.: 137352-75-1 Peso molecular: 172.23

PPB (Plasma Protein Binding)	[illegible] %		90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index
VD (Volume Distribution)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Optimal: 0.04-20 L/kg • Range [illegible]
BBB (Blood–Brain Barrier)	*	[illegible]		• BB ratio >=1: BBB+; BB ratio <=1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation [illegible]

40)

CBR01393



2-Methyl-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_9N_5$

CAS No.: 384860-18-8 Peso molecular: 175.19

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	[illegible] %		90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance [illegible]
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	*	[illegible]		• Razão BB >=1: BBB+; Razão BB <=1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB [illegible]

41)

CBR00198

3-(2,5-Dimethyl-1H-pyrrol-1-yl)aniline

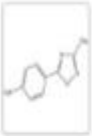
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{14}N_2$

CAS No.: 247225-33-8 Peso molecular: 186.25

PPB (Plasma Protein Binding)	[illegible] %		90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index
VD (Volume Distribution)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Optimal: 0.04-20 L/kg • Range [illegible]
BBB (Blood–Brain Barrier)	**	[illegible]		• BB ratio >=1: BBB+; BB ratio <=1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation [illegible]

42)

CBR00158



4-(3-Methyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)aniline

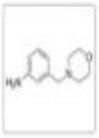
Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_3O$

CAS No.: 76635-31-9 Peso molecular: 175.19

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87.54%		95%	• Significativo: com drogas que não alcançam ligações a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.95 L/kg		0.04-10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10 L/kg • Alcance: <0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou alcançando hidrofílicos. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), alcançando lipofílicos
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.08		• Penetra BB: >+0.3 BBB+. Penetra BB: <-0.3 BBB- • Doses necessárias baixas: a melhorar a penetração do BBB. Ligações de H (total): 1-3 (1 PM) - 4(0-10 O). Seis acidos

43)

CDS007538



3-(morpholin-4-ylmethyl)aniline

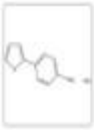
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}N_2O$

Peso molecular: 192.26

PPB (Plasma Protein Binding)	87.97%		95%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.
VD (Volume Distribution)	0.299 L/kg		0.04-10 L/kg	• Optimal: 0.04-10 L/kg • Range: <0.07L/kg: Confined to blood. Bound to plasma proteins or highly hydrophilic. 0.07-0.7L/kg: Evenly distributed. >0.7L/kg: Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid) highly lipophilic
BBB (Blood-Brain Barrier)	+++	0.904		• BB ratio >+0.3: BBB+. BB ratio <-0.3: BBB- • These features tend to improve BBB permeation. H-bonds (total) = 1-3 (1 MM) - 4(0-10 O). Six acids

44)

CBR00754



4-(2-Furyl)aniline hydrochloride

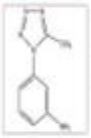
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{10}ClNO$

Peso molecular: 195.65

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86.87%		95%	• Significativo: com drogas que não alcançam ligações a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.044 L/kg		0.04-10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10 L/kg • Alcance: <0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou alcançando hidrofílicos. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), alcançando lipofílicos
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0.768		• Penetra BB: >+0.3 BBB+. Penetra BB: <-0.3 BBB- • Doses necessárias baixas: a melhorar a penetração do BBB. Ligações de H (total) = 1-3 (1 PM) - 4(0-10 O). Seis acidos

45)

CBR00286



3-(5-Methyl-1H-tetrazol-1-yl)aniline

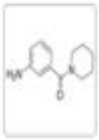
Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_9N_5$

CAS No.: 100701-24-4 Peso molecular: 175.19

PPB (Plasma Protein Binding)	87.54%		95%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index
VD (Volume Distribution)	0.045 L/kg		0.04-10 L/kg	• Optimal: 0.04-10 L/kg • Range: <0.07L/kg: Confined to blood. Bound to plasma proteins or highly hydrophilic. 0.07-0.7L/kg: Evenly distributed. >0.7L/kg: Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid) highly lipophilic
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.768		• BB ratio >+0.3: BBB+. BB ratio <-0.3: BBB- • These features tend to improve BBB permeation. H-bonds (total) = 1-3 (1 MM) - 4(0-10 O). Six acids

46)

PM010713



3-(1-piperidinylcarbonyl)aniline

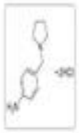
Fórmula Bruta: $C_{12}H_{16}N_2O$

Peso molecular: 204.274

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87.02%		95%	• Significativo: com drogas que não alcançam ligações a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.227 L/kg		0.04-10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10 L/kg • Alcance: <0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou alcançando hidrofílicos. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), alcançando lipofílicos
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0.82		• Penetra BB: >+0.3 BBB+. Penetra BB: <-0.3 BBB- • Doses necessárias baixas: a melhorar a penetração do BBB. Ligações de H (total) = 1-3 (1 PM) - 4(0-10 O). Seis acidos

47)

CBR00965



4-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride

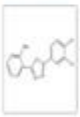
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}Cl_2N_2$

Peso molecular: 249.13

PPB (Plasma Protein Binding)	90.000 %		90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index
VD (Volume Distribution)	0.571 L/kg		0.04-20 L/kg	• Optimal: 0.04-20 L/kg • Range -0.071 L/kg: Confined to blood, bound to plasma proteins or highly hydrophilic; 0.07-0.7 L/kg: Evenly distributed; >0.7 L/kg: Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid) highly lipophilic
BBB (Blood-Brain Barrier)	***	0.934		• BB ratio: >1.1: BBB+; BB ratio: <0.1: BBB- • These features need to improve BBB permeation H-bonds (total): 1-3: 0.90; >4: 0.10; >6: 0.00; No acids

48)

PH016685



2-[5-(3,4-Dichlorophenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl]aniline

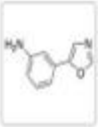
Formula linear: $C_{14}H_9Cl_2N_3O$

CAS No.: 179135-30-5

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	99.000%		90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	4.0 L/kg		0.04-20 L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance -0.071 L/kg: Confinado no sangue; Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico; 0.07-0.7 L/kg: Distribuído uniformemente; >0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios); altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.000		• Pseudo BB: >1.1: BBB+; Pseudo BB: <0.1: BBB- • Esses recursos precisam melhorar a modificação e permeação do BBB Ligações de H (total): 1-3: 0.750; >4: 0.250; Sem ácidos

49)

CD5014206



3-(1,3-oxazol-5-yl)aniline

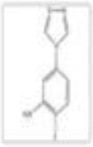
Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_8N_2O$

CAS No.: 157837-31-5 Peso molecular: 160.17

PPB (Plasma Protein Binding)	85.000 %		90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index
VD (Volume Distribution)	-0.106 L/kg		0.04-20 L/kg	• Optimal: 0.04-20 L/kg • Range -0.071 L/kg: Confined to blood, bound to plasma proteins or highly hydrophilic; 0.07-0.7 L/kg: Evenly distributed; >0.7 L/kg: Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid) highly lipophilic
BBB (Blood-Brain Barrier)	**	0.727		• BB ratio: >1.1: BBB+; BB ratio: <0.1: BBB- • These features need to improve BBB permeation H-bonds (total): 1-3: 0.909; >4: 0.091; No acids

50)

CBR00066



2-Fluoro-5-(4H-1,2,4-triazol-4-yl)aniline

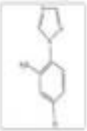
Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_7FN_4$

CAS No.: 1082766-13-9 Peso molecular: 178.17

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85.0%		90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	-0.091 L/kg		0.04-20 L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance -0.071 L/kg: Confinado no sangue; Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico; 0.07-0.7 L/kg: Distribuído uniformemente; >0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios); altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	**	0.73		• Pseudo BB: >1.1: BBB+; Pseudo BB: <0.1: BBB- • Esses recursos precisam melhorar a modificação e permeação do BBB Ligações de H (total): 1-3: 0.750; >4: 0.250; Sem ácidos

51)

CBR00446



5-Chloro-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)aniline

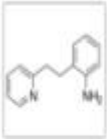
Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_7ClN_4$

CAS No.: 450399-92-5 Peso molecular: 194.62

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86.00%		90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	-0.052 L/kg		0.04-20 L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance -0.071 L/kg: Confinado no sangue; Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico; 0.07-0.7 L/kg: Distribuído uniformemente; >0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios); altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	**	0.73		• Pseudo BB: >1.1: BBB+; Pseudo BB: <0.1: BBB- • Esses recursos precisam melhorar a modificação e permeação do BBB Ligações de H (total): 1-3: 0.750; >4: 0.250; Sem ácidos

52)

CD500674



2-[2-(2-Pyridinyl)ethyl]aniline

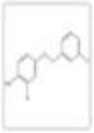
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{14}N_2$

Peso molecular: 198.26

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94.89%		95%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.594 L/kg		0.04-20 L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance: <0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.948		• Penetra BB >+0.3: BBB+. Penetra BB <-0.3: BBB- • Doses necessárias tendem a melhorar a penetração do BBB Ligações de H (total) = 0-10. PSA = 40-90. Sem ácidos

53)

VBP00085



2-Chloro-4-(3-fluorobenzyloxy)aniline

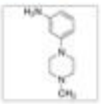
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}ClFNO$

Peso molecular: 251.68

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	93.85%		95%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	-0.796 L/kg		0.04-20 L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance: <0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.951		• Penetra BB >+0.3: BBB+. Penetra BB <-0.3: BBB- • Doses necessárias tendem a melhorar a penetração do BBB Ligações de H (total) = 0-10. PSA = 40-90. Sem ácidos

54)

CD9046833



3-(4-methylpiperazin-1-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{17}N_3$

Peso molecular: 191.27

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87.96%		95%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.45 L/kg		0.04-20 L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance: <0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0.796		• Penetra BB >+0.3: BBB+. Penetra BB <-0.3: BBB- • Doses necessárias tendem a melhorar a penetração do BBB Ligações de H (total) = 0-10. PSA = 40-90. Sem ácidos

55)

CBR01277

3-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}N_2 \cdot 2HCl$

Peso molecular: 249.18

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90.00%		95%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.004 L/kg		0.04-20 L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance: <0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+++	0.920		• Penetra BB >+0.3: BBB+. Penetra BB <-0.3: BBB- • Doses necessárias tendem a melhorar a penetração do BBB Ligações de H (total) = 0-10. PSA = 40-90. Sem ácidos

56)

CD5012378

3-chloro-4-(3-fluorobenzyloxy)aniline

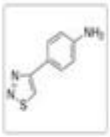
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}ClFNO$

Peso molecular: 251.68

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90.09%		95%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	-0.094 L/kg		0.04-20 L/kg	• Ótimo: 0.04-20 L/kg • Alcance: <0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0.876		• Penetra BB >+0.3: BBB+. Penetra BB <-0.3: BBB- • Doses necessárias tendem a melhorar a penetração do BBB Ligações de H (total) = 0-10. PSA = 40-90. Sem ácidos

57)

CDS014347



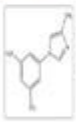
4-(1,2,3-thiadiazol-4-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_7N_3S$

Peso molecular: 177.23

58)

VBP00135



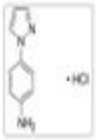
3-(4-Methyl-1*H*-imidazol-1-yl)-5-(trifluoromethyl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{10}F_3N_3$

CAS No: 641571-10-1 **Peso molecular:** 241.21

59)

CBR01115



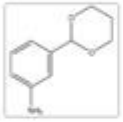
4-(1H-Pyrazol-1-yl)aniline hydrochloride

Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_{10}ClN_3$

Peso molecular: 195.65

60

TMT00020



3-(1,3-Dioxan-2-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{13}NO_2$

Peso molecular: 179.22

61)

S987107

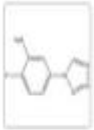
4-(2,4-DI-TERT-PENTYLOXY)ANILINE

Formula linear: $C_{22}H_{31}NO$

CAS No: 112302-67-9 **Peso molecular:** 325.498

62)

CBR02023



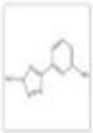
2-Fluoro-5-(1*H*-tetrazol-1-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_7H_6FN_5$

Peso molecular: 127.14

63)

CBR02060



3-(2-Methyl-2*H*-tetrazol-5-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_9N_5$

Peso molecular: 190.18

64)

CDS004111

4-(2-methyl-1,3-thiazol-4-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{10}N_2S$

CAS No.: 25021-49-2 **Peso molecular:** 190.26

65)

S508098

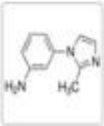
5-CHLORO-2-(P-TOLYLOXY)-ANILINE

Fórmula linear: $C_{13}H_{12}ClNO$

CAS No.: 16824-48-9 **Peso molecular:** 233.7

66)

CDS017202



3-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)aniline

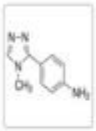
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{11}N_3$

Peso molecular: 173.21

67) CDS019943 3-Chloro-4-(3,5-dimethyl-1-piperidinyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{19}ClN_2$ Peso molecular: 238.76	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas) 90.00% 90% • Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Distribuição de Volume) 0.04 L/kg 0.04–0.8 L/kg • Ótimo: 0.04–0.8 L/kg • Viscosidade ~0.07 L/kg: Confinado ao sangue; Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico; 0.07–0.7 L/kg: Distribuído moderadamente; ~0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico BBB (Barreira Sangue-Cérebro) ++ 0.89 • Penetra BBB: >0.3: BBB+; Penetra BBB: <0.3: BBB- • Outros: necessário modelos e medições a permeação do BBB Ligações de H (total): 0–3: PM: ~400–500; baixo índice
68) PH016248 4-[(E)-2-(2-Pyridinyl)ethenyl]aniline dihydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{12}N_2 \cdot 2HCl$ Peso molecular: 269.17	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas) 94.00% 90% • Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Distribuição de Volume) 0.03 L/kg 0.04–0.8 L/kg • Ótimo: 0.04–0.8 L/kg • Viscosidade ~0.07 L/kg: Confinado ao sangue; Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico; 0.07–0.7 L/kg: Distribuído moderadamente; ~0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico BBB (Barreira Sangue-Cérebro) + 0.628 • Penetra BBB: >0.3: BBB+; Penetra BBB: <0.3: BBB- • Outros: necessário modelos e medições a permeação do BBB Ligações de H (total): 0–3: PM: ~400–500; baixo índice
69) CDS005603 4-(4'-aminomethyl)phenyl-1-*N*-Boc-aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{18}H_{22}N_2O_2$ Peso molecular: 298.38	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas) 90.00% 90% • Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Distribuição de Volume) 0.092 L/kg 0.04–0.8 L/kg • Ótimo: 0.04–0.8 L/kg • Viscosidade ~0.07 L/kg: Confinado ao sangue; Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico; 0.07–0.7 L/kg: Distribuído moderadamente; ~0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico BBB (Barreira Sangue-Cérebro) + 0.520 • Penetra BBB: >0.3: BBB+; Penetra BBB: <0.3: BBB- • Outros: necessário modelos e medições a permeação do BBB Ligações de H (total): 0–3: PM: ~400–500; baixo índice
70) S6290T3 2-(2-(4-TERT-OCTYLPHENOXY)ETHOXY)ANILINE Formula Base: $C_{22}H_{31}NO_2$ CAS No.: 116000-42-4 Peso molecular: 341.49	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas) 96.7% 90% • Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Distribuição de Volume) 0.05 L/kg 0.04–0.8 L/kg • Ótimo: 0.04–0.8 L/kg • Viscosidade ~0.07 L/kg: Confinado ao sangue; Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico; 0.07–0.7 L/kg: Distribuído moderadamente; ~0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico BBB (Barreira Sangue-Cérebro) ++ 0.798 • Penetra BBB: >0.3: BBB+; Penetra BBB: <0.3: BBB- • Outros: necessário modelos e medições a permeação do BBB Ligações de H (total): 0–3: PM: ~400–500; baixo índice
71) TMT00306 4-(2-(Pyridin-4-yl)ethyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{14}N_2$ CAS No.: 6318-70-3 Peso molecular: 198.26	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas) 96.87% 90% • Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico VD (Distribuição de Volume) 0.07 L/kg 0.04–0.8 L/kg • Ótimo: 0.04–0.8 L/kg • Viscosidade ~0.07 L/kg: Confinado ao sangue; Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico; 0.07–0.7 L/kg: Distribuído moderadamente; ~0.7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico BBB (Barreira Sangue-Cérebro) + 0.532 • Penetra BBB: >0.3: BBB+; Penetra BBB: <0.3: BBB- • Outros: necessário modelos e medições a permeação do BBB Ligações de H (total): 0–3: PM: ~400–500; baixo índice

72)

CDS015579



4-(4-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)aniline

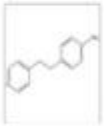
Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_{10}N_4$

Peso molecular: 174.20

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	96.027%		99%	• Significativo: essa droga que não alcançará ligações a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	-0.0895 L/kg		0.04-10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10L/kg • Vantagem -0.07L/kg: Confinado no sangue. Ligado a proteínas plasmáticas no alcance hidrofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), alcançando lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0.03		• Penetração BBB >+1: BBB+. Penetração BBB <-1: BBB- • Essas medidas são úteis a medicinas e a permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10. PSA = 40-90. Seus ácidos

73)

TMT00306



4-(2-(Pyridin-4-yl)ethyl)aniline

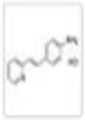
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{14}N_2$

CAS No.: 6318-70-3 Peso molecular: 198.26

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	96.027%		99%	• Significativo: essa droga que não alcançará ligações a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.2711 L/kg		0.04-10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10L/kg • Vantagem -0.07L/kg: Confinado no sangue. Ligado a proteínas plasmáticas no alcance hidrofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), alcançando lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.032		• Penetração BBB >+1: BBB+. Penetração BBB <-1: BBB- • Essas medidas são úteis a medicinas e a permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10. PSA = 40-90. Seus ácidos

74)

PH019167



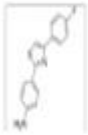
(E)-4-(2-(Pyridin-2-yl)vinyl)aniline hydrochloride

Fórmula linear: $C_{13}H_{12}N_2O_2$

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	96.027%		99%	• Significativo: essa droga que não alcançará ligações a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.0127 L/kg		0.04-10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10L/kg • Vantagem -0.07L/kg: Confinado no sangue. Ligado a proteínas plasmáticas no alcance hidrofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), alcançando lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.028		• Penetração BBB >+1: BBB+. Penetração BBB <-1: BBB- • Essas medidas são úteis a medicinas e a permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10. PSA = 40-90. Seus ácidos

75)

CDS000062



4-[4-(4-fluorophenyl)-1,3-thiazol-2-yl]aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{15}H_{11}FN_2S$

Peso molecular: 270.32

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	92.077%		99%	• Significativo: essa droga que não alcançará ligações a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.6017 L/kg		0.04-10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10L/kg • Vantagem -0.07L/kg: Confinado no sangue. Ligado a proteínas plasmáticas no alcance hidrofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), alcançando lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0.018		• Penetração BBB >+1: BBB+. Penetração BBB <-1: BBB- • Essas medidas são úteis a medicinas e a permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10. PSA = 40-90. Seus ácidos

76)

BBO000510

4-(2-(Pyrrolidin-1-yl)ethyl)aniline hydrochloride

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{19}N_3 \cdot HCl$

Peso molecular: 226.75

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	96.027%		99%	• Significativo: essa droga que não alcançará ligações a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.0977 L/kg		0.04-10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10L/kg • Vantagem -0.07L/kg: Confinado no sangue. Ligado a proteínas plasmáticas no alcance hidrofílico. 0.07-0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), alcançando lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.028		• Penetração BBB >+1: BBB+. Penetração BBB <-1: BBB- • Essas medidas são úteis a medicinas e a permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10. PSA = 40-90. Seus ácidos

77)

OTV000493

3-(6-Methylimidazo[1,2-a]pyridin-2-yl)aniline

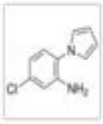
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{14}H_{13}N_3$

Peso molecular: 223.27

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	[illegible]		[illegible]	• Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Ótimo: 0,04-2,0 L/kg • Variabilidade -0,07 L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7 L/kg: Distribuído uniformemente. >0,7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	[illegible]		• Penetra BB -<0,1: BBB+. Penetra BB >0,1: BBB- • Dados necessários: medidas e modificações na permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10, PSA = 400-900, baixo acidico

78)

PH010467



5-chloro-2-(1H-pyrrol-1-yl)aniline

Formula linear: $C_{10}H_9ClN_2$

Peso molecular: 192.65

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	[illegible]		[illegible]	• Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Ótimo: 0,04-2,0 L/kg • Variabilidade -0,07 L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7 L/kg: Distribuído uniformemente. >0,7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	1	[illegible]		• Penetra BB -<0,1: BBB+. Penetra BB >0,1: BBB- • Dados necessários: medidas e modificações na permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10, PSA = 400-900, baixo acidico

79)

OTV000492

3-(6-Methylimidazo[1,2-a]pyridin-2-yl)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{14}H_{13}N_3$

Peso molecular: 223.27

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	[illegible]		[illegible]	• Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Ótimo: 0,04-2,0 L/kg • Variabilidade -0,07 L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7 L/kg: Distribuído uniformemente. >0,7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	[illegible]		• Penetra BB -<0,1: BBB+. Penetra BB >0,1: BBB- • Dados necessários: medidas e modificações na permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10, PSA = 400-900, baixo acidico

80)

OTV000863

4-Bromo-2-(2-(pyrrolidin-1-yl)ethoxy)aniline

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{17}BrN_2O$

Peso molecular: 285.28

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	[illegible]		[illegible]	• Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Ótimo: 0,04-2,0 L/kg • Variabilidade -0,07 L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7 L/kg: Distribuído uniformemente. >0,7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	1	[illegible]		• Penetra BB -<0,1: BBB+. Penetra BB >0,1: BBB- • Dados necessários: medidas e modificações na permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10, PSA = 400-900, baixo acidico

81)

CBR00697

4-[(5-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)methyl]aniline dihydrochloride

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{13}N_5$

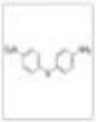
Peso molecular: 231.33

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	[illegible]		[illegible]	• Significativo: com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	[illegible] L/kg		[illegible] L/kg	• Ótimo: 0,04-2,0 L/kg • Variabilidade -0,07 L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7 L/kg: Distribuído uniformemente. >0,7 L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	-	[illegible]		• Penetra BB -<0,1: BBB+. Penetra BB >0,1: BBB- • Dados necessários: medidas e modificações na permeação do BBB Ligações de H (total) = 3-10, PSA = 400-900, baixo acidico

82) TMT00114 4-Chloro-3-(5,7-dimethylbenzo[d]oxazol-2-yl)aniline	
83) TMT00139 2,6-Dibromo-4-(6-methylbenzo[d]thiazol-2-yl)aniline	
84) 191558 4-Aminobenzyl alcohol	
85) 663204 2-Morpholinoaniline	
86) 364797 Disperse Orange 3	

87)

A69188



4-Amino-4'-nitrodiphenyl sulfide

CAS No.: 101-59-7 Peso molecular: 246.29

EC No.: 202-957-1

88)

773794

4-Aminophenyl propargyl ether

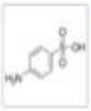
Sinónimo(s): 4-prop-2-ynyloxyaniline

Empirical Formula (Hill Notation): C_9H_9NO

CAS No.: 26657-78-8 Peso molecular: 147.17

89)

251917



Sulfanilic Acid

CAS No.: 121-57-3 Peso molecular: 173.19

EC No.: 204-482-5

90)

656629

N-(4-Aminophenyl)piperidine

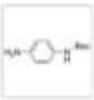
Sinónimo(s): 4-(1-Piperidinyl)aniline, 4-(1-Piperidinyl)-benzenamine

Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}N_2$

CAS No.: 2359-60-6 Peso molecular: 176.26

91)

15485



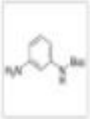
***N*-Boc-*p*-phenylenediamine**

CAS No.: 71026-66-9 Peso molecular: 208.26

EC No.: 275-132-7

92)

53175



N-Boc-m-phenylenediamine

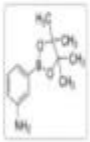
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{18}N_2O_2$

CAS No.: 68621-88-5 Peso molecular: 208.26

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	96.00%		90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	-0.045 L/kg		0.04–10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10L/kg • Variabilidade -0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07–0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0.723		• Penetra BBB. >0.1: BBB+. Penetra BBB. <-0.1: BBB- • Doses necessárias também a considerar a permeação do BBB Ligações de H (total) = 0–2. PSA = 400–700. Sem ácidos

93)

574686



3-Aminophenylboronic acid pinacol ester

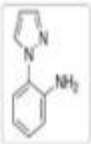
Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{18}BNO_2$

CAS No.: 250907-84-9 Peso molecular: 219.09

PPB (Plasma Protein Binding)	79.46%		90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index
VD (Volume Distribution)	0.597 L/kg		0.04–10 L/kg	• Optimal: 0.04-10L/kg • Range -0.07L/kg: Confined to blood. Bound to plasma proteins or highly hydrophilic. 0.07–0.7L/kg: Evenly distributed. >0.7L/kg: Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid/highly lipophilic
BBB (Blood-Brain Barrier)	----	0.206		• BB ratio >0.1: BBB+. BB ratio <-0.1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation H-bonds (total) = 0–10. MW = 400–700. No acids

94)

753000



1-(2-Aminophenyl)-1H-pyrazole

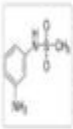
Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_3$

CAS No.: 54705-91-8 Peso molecular: 159.19

PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90.00%		90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.000 L/kg		0.04–10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10L/kg • Variabilidade -0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07–0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.050		• Penetra BBB. >0.1: BBB+. Penetra BBB. <-0.1: BBB- • Doses necessárias também a considerar a permeação do BBB Ligações de H (total) = 0–10. PSA = 400–700. Sem ácidos

95)

548278



N-(3-Aminophenyl)methanesulfonamide

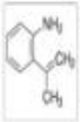
Empirical Formula (Hill Notation): $C_7H_{10}N_2O_2S$

CAS No.: 37045-73-1 Peso molecular: 186.23

PPB (Plasma Protein Binding)	84.87%		90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index
VD (Volume Distribution)	-0.745 L/kg		0.04–10 L/kg	• Optimal: 0.04-10L/kg • Range -0.07L/kg: Confined to blood. Bound to plasma proteins or highly hydrophilic. 0.07–0.7L/kg: Evenly distributed. >0.7L/kg: Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid/highly lipophilic
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.748		• BB ratio >0.1: BBB+. BB ratio <-0.1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation H-bonds (total) = 0–10. MW = 400–700. No acids

96)

194213



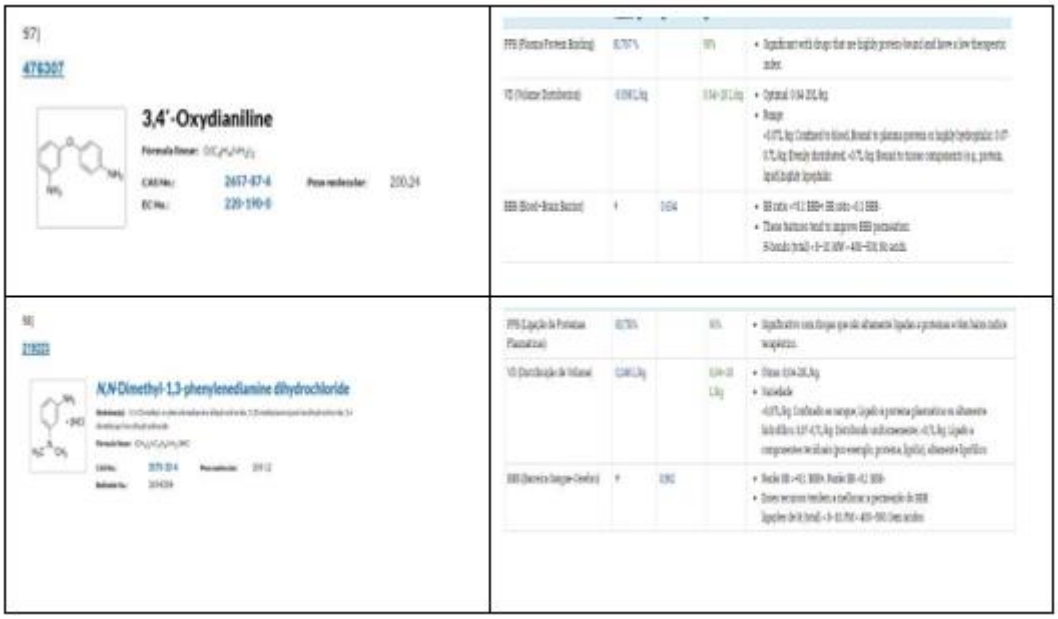
2-Isopropenylaniline

Formula linear: $H_2N{-}C_6H_4{-}C(CH_3){=}CH_2$

CAS No.: 52562-19-3 Peso molecular: 133.19

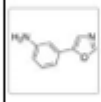
EC No.: 258-008-7 Beilstein No.: 2081217

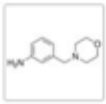
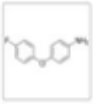
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85.27%		90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico
VD (Distribuição de Volume)	0.2 L/kg		0.04–10 L/kg	• Ótimo: 0.04-10L/kg • Variabilidade -0.07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente lipofílico. 0.07–0.7L/kg: Distribuído uniformemente. >0.7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios), altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0.707		• Penetra BBB. >0.1: BBB+. Penetra BBB. <-0.1: BBB- • Doses necessárias também a considerar a permeação do BBB Ligações de H (total) = 0–10. PSA = 400–700. Sem ácidos



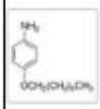
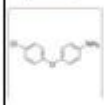
97]				
476307				
3,4'-Oxydianiline				
CAS No.: 2657-87-4	Peso molecular: 200.24			
EC No.: 220-190-0				
PPB (Pressão Parcial Basolateral)	[illegible]		[illegible]	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.
VD (Volume Distribuição)	[illegible]		[illegible]	• Optimal: [illegible] L/kg • Range: [illegible] Confined to blood. Bound to plasma proteins or highly hydrophilic. [illegible] Evenly distributed. [illegible] Bound to tissue components (e.g., proteins, lipid) highly lipophilic
BBB (Blood–Brain Barrier)	[illegible]	[illegible]		• BB ratio [illegible] BBB+ BB ratio [illegible] BBB- • These features tend to improve BBB permeation. [illegible]
98]				
219323				
N,N-Dimethyl-1,3-phenylenediamine dihydrochloride				
[illegible]	[illegible]			
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	[illegible]		[illegible]	• Significantes com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.
VD (Distribuição de Volume)	[illegible]		[illegible]	• Ótimo: [illegible] L/kg • Variedade [illegible] Confinado ao sangue. Ligado a proteínas plasmáticas ou altamente hidrofílico. [illegible] Distribuído uniformemente. [illegible] Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteínas, lipídios); altamente lipofílico
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	[illegible]	[illegible]		• Razão BB [illegible] BBB+. Razão BB [illegible] BBB- • Estes recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H [illegible]

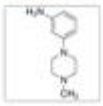
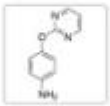
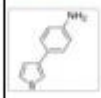
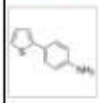
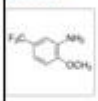
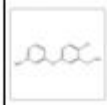
ANEXO C - SCORE DAS MOLÉCULAS

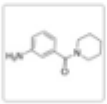
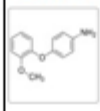
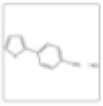
Classificação	Moléculas	BBB	Inibidor de quinase	Inibidor de enzima	Nota total
1)Molécula 49	49) CDS014208  3-(1,3-oxazol-5-yl)aniline CAS No.: 157837-31-5 Peso molecular: 160.17	0,727x3=2,181	0,94 x 2=1,88	0,62 x 1=0,62	4,681
2)Molécula 47	47) CBR00968 4-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride Peso molecular: 249.18	0,934x3=2,802	0,67 x 2=1,34	0,26 x 1=0,26	4,402
3)Molécula 55	55) CBR01277 3-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride Peso molecular: 249.18	0,929x3=2,787	0,67 x 2=1,34	0,25 x 1=0,25	4,377

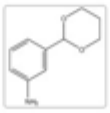
4)Molécula 43	43) CDS007538  3-(morpholin-4-ylmethyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}N_2O$ Peso molecular: 192.26	0,934x3=2,802	0,66x 2=1,32	0,20x 1=0,20	4,322
5)Molécula 27	27)217778 4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)aniline CAS No.: 2357-47-3 Peso molecular: 179.11 EC No.: 219-095-7	0,844x3=2,532	0,74 x 2=1,48	0,24 x 1=0,24	4,255
6)Molécula 01	1) Produto n° 695408  4-(4-Fluorophenoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{10}FNO$ CAS No.: 36160-82-4 Peso molecular: 203.21	0,889x3=2,667	0,67 x 2= 1,34	0,23 x 1=0,23	4,237
7)Molécula 06	6) 224936 4-(Trifluoromethyl)aniline CAS No.: 455-14-1 Peso molecular: 161.12 EC No.: 207-236-5 Beilstein No.: 1364853	0,853x 3=2,559	0,71 x 2=1,42	0,24 x 1=0,24	4,219
8)Molécula 84	84) 191558 4-Aminobenzyl alcohol CAS No.: 623-04-1 Peso molecular: 123.15 EC No.: 210-767-9 Beilstein No.: 2079680	0,738x 3=2,214	0,78 x 2=1,56	0,40 x 1=0,40	4,174
9)Molécula 11	11)193136 3,5-Bis(trifluoromethyl)aniline CAS No.: 328-74-5 Peso molecular: 229.12 EC No.: 206-330-0 Beilstein No.: 654018	0,907 3= 2,721	0,62 x 2=1,24	0,21 x 1=0,21	4,171

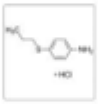
10)Molécula 33	33) CBR00034 **4-[(1-Methylpiperidin-4-yl)oxy]aniline** CAS No.: 358789-72-7 Peso molecular: 206.28	0,82x 3=2,487	0,69 x 2=1,38	0,30 x 1=0,30	4,167
11)Molécula 85	85) 663204 **2-Morpholinoaniline** CAS No.: 5585-33-1 Peso molecular: 178.23	0,887x 3=2,661	0,66 x 2=1,32	0,18 x 1=0,18	4,161
12)Molécula 13	13)CBR00049 **4-(Pyridin-3-yloxy)aniline** CAS No.: 80650-45-9 Peso molecular: 186.21	0,688x 3=2,064	0,86 x 2=1,72	0,33 x 1=0,33	4,114
13)Molécula 19	19)337056 **4-(Trifluoromethoxy)aniline** CAS No.: 461-82-5 Peso molecular: 177.12 EC No.: 207-317-5 Beilstein No.: 2090209	0,877 x 3=2,631	0,62 x 2=1,24	0,24 x 1=0,24	4,111
14)Molécula 90	90) 556629 ***N*-(4-Aminophenyl)piperidine** CAS No.: 2359-60-6 Peso molecular: 176.26	0,865x 3=2,595	0,64 x 2=1,28	0,23 x 1=0,23	4,105
15)Molécula 18	18)222100 **4-(Hexyloxy)aniline** CAS No.: 39905-57-2 Peso molecular: 193.29 EC No.: 254-696-8	0,892x 3=2,676	0,56 x 2=1,12	0,25 x 1=0,25	4,046

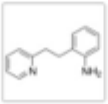
16)Molécula 34	34) T340006  **4-(HEPTYLOXY)ANILINE**	0,901x 3=2,703	0,54 x 2=1,08	0,24 x 1=0,24	4,023
17)Molécula 26	26)001274 **3-Chloro-4-(4-chlorophenoxy)aniline**	0,835x 3=2,505	0,64 x 2= 1,28	0,20 x 1=0,20	3,985
18)Molécula 23	23)CBR00361 **4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline**	0,749x 3=2,247	0,74 x 2=1,48	0,24 x 1=0,24	3,967
19)Molécula 56	56) CD5012278 **3-chloro-4-(3-fluorobenzyloxy)aniline**	0,876x 3=2,628	0,59 x 2= 1,18	0,15 x 1=0,15	3,958
20)Molécula 10	10)695386  **4-(4-Chlorophenoxy)aniline**	0,825x 3=2,475	0,63 x 2=1,26	0,21 x 1=0,21	3,945
21)Molécula 30	30)217727 **4-Chloro-2-(trifluoromethyl)aniline**	0,83 x 3=2,49	0,62 x 2=1,24	0,20 x 1= 0,20	3,93

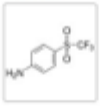
22)Molécula 54	54) CD5004833  3-(4-methylpiperazin-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{17}N_3$ Peso molecular: 191.27	0,769 x 3=2,307	0,70 x 2=1,4	0,19 x 1=0,19	3,897
23)Molécula 31	31) CD5006360  4-(2-Pyrimidinyloxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_9N_3O$ Peso molecular: 187.20	0,641 x 3=1,923	0,80 x 2=1,60	0,34 x 1=0,34	3,863
24)Molécula 12	12)650080  4-(Thiophen-3-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_9NS$ CAS No.: 63884-70-5 Peso molecular: 175.25	0,601 x 3=1,803	0,85 x 2=1,7	0,31 x 1=0,31	3,813
25)Molécula 20	20)654668  4-(Thiophen-2-yl)aniline Sinónimo(s): 4-(2-Tienil)anilina Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_9NS$ CAS No.: 70033-48-9 Peso molecular: 175.25	0,601 x 3=1,803	0,85 x 2=1,7	0,31 x 1=0,31	3,813
26)Molécula 29	336599  2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline Sinónimo(s): 4-Methoxy-3-(2,2,2-trifluoro-n-toluidine Formula linear: $CH_3OC_6H_3(CF_3)NH_2$ CAS No.: 349-65-5 Peso molecular: 191.15	0,786 x 3=2,358	0,64 x 2=1,28	0,18 x 1=0,18	3,818
27) Molécula 05	5)PH016744  3-(4-Chloro-3-ethylphenoxy)aniline Formula linear: $C_{14}H_{14}ClO/H_2O_1$ CAS No.: 263266-18-8	0,862 x 3=2,586	0,53 x 2= 1,06	0,16 x 1=0,16	3,806

28)Molécula 95	95) 948278 *N*-(3-Aminophenyl)methanesulfonamide	0,748 x 3=2,244	0,65 x2= 1,3	0,26 x 1=0,26	3,804
29)Molécula 46	46) PH010713  3-(1-piperidinylcarbonyl)aniline Fórmula linear: $C_{12}H_{16}N_2O$ Peso molecular: 204.274	0,82 x 3=2,46	0,57 x 2=1,14	0,20 x 1=0,20	3,8
30)Molécula 09	9)CBR01173  4-(2-Methoxyphenoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{13}NO_2$ CAS No.: 13066-01-8 Peso molecular: 215.25	0,78 x 3=2,34	0,61 x 2=1,22	0,23 x 1=0,23	3,79
31)Molécula 93	93) 874686 3-Aminophenylboronic acid pinacol ester Sinónimo: 3-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{18}BNO_2$ CAS No.: 210907-84-9 Peso molecular: 219.09	0,299 x 3=0,897	0,94 x 2=1,88	1,01 x 1= 1,01	3,787
32)Molécula 44	44) CBR00754  4-(2-Furyl)aniline hydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{10}ClNO$ Peso molecular: 195.65	0,785 x 3=2,355	0,60 x 2=1,2	0,16 x 1=0,16	3,715

33)Molécula	68) PH016248 4-[(*E*)-2-(2-Pyridinyl)ethenyl]aniline dihydrochloride	0,628x3=1,884	0,75 x 2=1,5	0,33 x 1=0,33	3,714
34)Molécula 74	74) PH019167 (E)-4-(2-(Pyridin-2-yl)vinyl)aniline hydrochloride	0,628x3=1,884	0,75 x 2=1,5	0,33 x 1=0,33	3,714
35)Molécula 60	60 TMT00020  3-(1,3-Dioxan-2-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{13}NO_2$ Peso molecular: 179.22	0,782 x 3=2,346	0,52 x 2=1,04	0,29 x 1=0,29	3,676
36)Molécula 67	67) CD5019943 3-Chloro-4-(3,5-dimethyl-1-piperidinyl)aniline	0,89 x 3=2,67	0,46 x 2=0,92	0,06 x 1=0,06	3,65
37)Molécula 63	63) CBR02060 3-(2-Methyl-*2H*-tetrazol-5-yl)aniline Peso molecular: 190.28	0,66 x 3=1,98	0,68 x 2=1,36	0,30 x 1=0,30	3,64
38)Molécula 76	76) BBO000610 4-(2-(Pyrrolidin-1-yl)ethyl)aniline hydrochloride	0,628 x 3=1,884	0,69 x 2=1,38	0,33 x 1=0,33	3,594

39)Molécula 78	78) PH010467 **5-chloro-2-(1H-pyrrol-1-yl)aniline** Formula linear: $C_{10}H_9ClN_2$ Peso molecular: 192.65	0,68 x 3=2,04	0,67 x 2=1,34	0,21 x 1=0,21	3,59
40)Molécula 32	32) CBR01438  **4-(Propylthio)aniline hydrochloride** Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_{13}NS \cdot HCl$ Peso molecular: 203.73	0,817 x 3=2,451	0,46 x 2=0,92	0,20 x 1=0,20	3,571
41)Molécula 72	72) CD5015579 **4-(4-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_{10}N_4$ Peso molecular: 174.20	0,83 x 3=2,49	0,45 x 2=0,9	0,17 x 1=0,17	3,56
42)Molécula 97	97) 476307 **3,4'-Oxydianiline** Formula linear: $OC_6H_4(NH_2)_2$ CAS No.: 2657-87-6 Peso molecular: 200.24 EC No.: 220-190-0	0,634 x 3=1,902	0,69 x 2= 1,38	0,27 x 1=0,27	3,552
43)Molécula 91	91) 19485 ***N*-Boc-*p*-phenylenediamine** Formula linear: $(CH_3)_3COCO(H)NC_6H_4NH_2$ CAS No.: 73020-66-9 Peso molecular: 208.26 EC No.: 275-132-7 Beilstein No.: 2969618	0,723 x 3=2,169	0,56 x 2=1,12	0,26 x 1=0,26	3,549
44) Molécula 92	92) 53178 ***N*-Boc-*m*-phenylenediamine** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{18}N_2O_2$ CAS No.: 68621-88-5 Peso molecular: 208.26	0,713 x 3=2,139	0,57 x 2=1,14	0,25 x 1=0,25	3,529

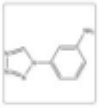
45) Molécula 59	38) CBR01118 4-(1H-Pyrazol-1-yl)aniline hydrochloride	0,519 x 3=1,557	0,80 x 2= 1,60	0,35 x 1=0,35	3,507
46)Molécula 08	8)695394 4-(4-Bromophenoxy)aniline CAS No.: 31465-35-7 Peso molecular: 264.12	0,706 x 3=2,109	0,60 x 2=1,20	0,18 x 1=0,18	3,489
47)Molécula 52	52) CDS00674  2-[2-(2-Pyridinyl)ethyl]aniline Peso molecular: 198.26	0,545 x 3=1,635	0,74 x 2=1,48	0,36 x 1=0,36	3,475
48)Molécula 17	17)886446 3-(Difluoromethoxy)aniline CAS No.: 22236-08-4 Peso molecular: 159.13	0,784 x 3=2,352	0,46 x 2=0,92	0,20 x1=0,20	3,472
49)Molécula 14	14)KOB0081 4-[(Phenylsulfanyl)methyl]aniline CAS No.: 13738-70-0 Peso molecular: 215.31	0,781 x 3=2,343	0,46 x 2=0,92	0,19 x 1=0,19	3,453
50)Molécula 58	58) VBP00108 3-(4-Methyl-1*H*-imidazol-1-yl)-5-(trifluoromethyl)aniline	0,55 x 3=1,65	0,69 X 2= 1,38	0,40 X 1=0,40	3,43

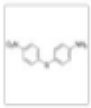
51)Molécula 16	16)481920  4-(Trifluoromethylsulfonyl)aniline	0,707 x 3=2,121	0,48 x 2=0,96	0,33 x 1=0,33	3,411
52)Molécula 42	42) CBR00158 4-(3-Methyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)aniline	0,695 x 3=2,085	0,55 x 2=1,1	0,22 x 1=0,22	3,405
53)Molécula 80	80) OTV000062 4-Bromo-2-(2-(pyrrolidin-1-yl)ethoxy)aniline	0,661x3=1,983	0,63 x 2=1,26	0,16 x 1=0,16	3,403
54)Molécula 02	2) CBR01220 4-(Tetrahydrofuran-2-ylmethoxy)aniline	0,836 x 3=2,508	0,40 x 2=0,8	0,08 x 1=0,08	3,388
55)Molécula 89	89) 201917 Sulfanilic Acid	0,629 x 3=1,887	0,55 x 2=1,1	0,39 x 1= 0,39	3,377
56)Molécula 98	98) 219223 N,N-Dimethyl-1,3-phenylenediamine dihydrochloride	0,562 x 3=1,686	0,73 x 2=1,46	0,23 x 1=0,23	3,376

57)Molécula 53	(53) VBP00085 **2-Chloro-4-(3-fluorobenzyloxy)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}ClFNO$ Peso molecular: 251.68	0,511x3=1,533	0,74 x 2=1,48	0,36 x 1=0,36	3,373
58)Molécula 35	35) S704121 **2-(BENZYLTHIO)ANILINE** Fórmula linear: $C_{13}H_{13}NS$ CAS No.: 4325-92-4 Peso molecular: 215.319	0,648x3=1,944	0,57 x 2=1,14	0,28 x 1=0,28	3,364
59)Molécula 50	(60) CBR00066 **2-Fluoro-5-(4H-1,2,4-triazol-4-yl)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_7FN_4$ CAS No.: 1082766-13-9 Peso molecular: 178.17	0,71 x 3=2,13	0,56 x 2=1,12	0,06 x 1=0,06	3,31
60)Molécula 38	(38) CBR00087 **4-(2-Morpholin-4-yl-2-oxoethoxy)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{16}N_2O_3$ CAS No.: 74870-09-2 Peso molecular: 236.27	0,781 x 3=2,343	0,45 x 2=0,9	0,06 x 1=0,06	3,303
61)Molécula 73	(73) TMT00306 **4-(2-(Pyridin-4-yl)ethyl)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{14}N_2$ CAS No.: 6318-70-3 Peso molecular: 198.26	0,532x3=1,596	0,69 x 2=1,38	0,31 x 1=0,31	3,286
62)Molécula 39	(39) CBR00524 **2-Methyl-3-(1H-pyrrol-1-yl)aniline** Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{12}N_2$ CAS No.: 137352-75-1 Peso molecular: 172.23	0,69 x 3=2,07	0,55 x 2=1,1	0,11 x 1=0,11	3,28

63)Molécula 66	66) CD5017202 3-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{11}N_3$ Peso molecular: 173.21	0,534 x 3=1,602	0,69 x 2=1,38	0,29 x 1=0,29	3,272
64)Molécula 51	51) CBR00448 5-Chloro-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_6ClN_4$ CAS No.: 450399-92-5 Peso molecular: 194.62	0,719x3=2,157	0,54 x 2=1,08	0,01 x 1=0,01	3,247
65)Molécula 70	70) S629073 2-(2-(4-TERT-OCTYLPHENOXY)ETHOXY)ANILINE Formula linear: $C_{22}H_{31}NO_2$ CAS No.: 114303-82-4 Peso molecular: 341.498	0,769 x 3=2,307	0,38 x 2=0,76	0,12 x 1=0,12	3,187
66)Molécula 65	65) S508098 5-CHLORO-2-(P-TOLYLOXY)-ANILINE Fórmula linear: $C_{13}H_{12}ClNO$ CAS No.: 16824-48-9 Peso molecular: 233.7	0,647 x 3=1,941	0,55 x 2=1,1	0,13 x 1=0,13	3,171
67)Molécula 61	61) S987107 4-(2,4-DI-TERT-PENTYLOXY)ANILINE Formula linear: $C_{22}H_{31}NO$ CAS No.: 112322-67-9 Peso molecular: 325.498	0,677 x 3=2,031	0,45 x 2=0,9	0,23 x 1=0,23	3,161
68)Molécula 28	28)CBR00351 4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}N_3$ CAS No.: 52708-36-8 Peso molecular: 209.25	0,749 x 3=1,437	0,74 x 2=1,48	0,24 x 1=0,24	3,157

69)Molécula 96	96) 194212 2-Isopropenylaniline CAS No.: 52562-19-3 Peso molecular: 133.19 EC No.: 258-008-7 Beilstein No.: 3081217	0,587 x 3=1,761	0,57 x 2=1,14	0,22 x 1=0,22	3,121
70)Molécula 37	37) CBR00244 3-Methoxy-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline CAS No.: 883291-48-3 Peso molecular: 191.19	0,728x3=2,184	0,45 x 2=0,9	0,03 x 1=0,03	3,114
71)Molécula 36	36) CBR00266 3-(5-Methyl-1H-tetrazol-1-yl)aniline CAS No.: 500701-24-6 Peso molecular: 175.19	0,744 x 3=2,32	0,36 x 2=0,72	0,06 x 1=0,06	3,1
72)Molécula 45	45) CBR00266 3-(5-Methyl-1H-tetrazol-1-yl)aniline CAS No.: 500701-24-6 Peso molecular: 175.19	0,744 x 3=2,232	0,36 x 2=0,72	0,06 x 1 =0,06	3,012
73)Molécula 41	41) CBR00198 3-(2,5-Dimethyl-1H-pyrrol-1-yl)aniline CAS No.: 247225-33-8 Peso molecular: 186.25	0,723x3=2,169	0,45 x 2=0,9	0,02 x 1=0,02	3,089
74)Molécula 57	57) CDS014347 4-(1,2,3-thiadiazol-4-yl)aniline Peso molecular: 177.23	0,258x3=0,774	0,87 X 2=1,74	0,47 X 1=0,47	2,984

75)Molécula 48	48) PH016685 2-[5-(3,4-Dichlorophenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl]aniline	0,655x3=1,965	0,41 x 2=0,82	0,19 x 1=0,19	2,975
76)Molécula 04	4) CBR01855  3-(*1H*-Tetrazol-1-yl)aniline CAS No.: 14213-12-8 Peso molecular: 161.16	0,646 x 3=1,938	0,49 x 2= 0,98	0,05 x 1=0,05	2,968
77)Molécula 24	24) CBR00078 2-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline CAS No.: 14210-51-6 Peso molecular: 161.16	0,673 x 3=2,019	0,47 x 2=0,94	-0,02 x 1= -0,02	2,939
78)Molécula 25	25)CBR00260 4-(1H-Tetrazol-5-yloxy)aniline CAS No.: 467226-44-4 Peso molecular: 177.16	0,461 x 3=1,383	0,66 x 2=1,32	0,23 x 1=0,23	2,933
79)Molécula 94	94) 753200 1-(2-Aminophenyl)-1*H*-pyrazole CAS No.: 54705-91-8 Peso molecular: 159.19	0,555 x 3=1,665	0,60 x 2= 1,2	0,04 x 1=0,04	2,905
80)Molécula 62	62) CBR02023 2-Fluoro-5-(*1H*-tetrazol-1-yl)aniline Peso molecular: 127.14	0,583 x 3=1,749	0,51 x 2=1,02	0,01 x 1=0,01	2,779

81)Molécula 88	88) 773794 4-Aminophenyl propargyl ether CAS No.: 26657-78-8 Peso molecular: 147.17	0,722 x 3=1,166	0,62 x2=1,24	0,27 x 1=0,27	2,676
82)Molécula 87	87) AG9188  4-Amino-4'-nitrodiphenyl sulfide CAS No.: 101-59-7 Peso molecular: 246.29 EC No.: 202-957-1	0,544 x 3=1,632	0,43 x 2=0,86	0,17 x 1=0,17	2,662
83)Molécula 81	81) CBR00697 4-[(5-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)methyl]aniline dihydrochloride	0,345x3=1,035	0,67 x 2=1,34	0,24 x 1=0,24	2,615
84)Molécula 71	71) TMT00306 4-(2-(Pyridin-4-yl)ethyl)aniline CAS No.: 6318-70-3 Peso molecular: 198.26	0,532 x 3=1,596	0,69 x 2=0,69	0,31 x 1=0,31	2,596
85)Molécula 69	69) CD9006603 4-(4'-aminomethyl)phenyl-1-*N*-Boc-aniline Peso molecular: 298.38	0,528x3=1,584	0,38 x 2=0,76	0,22 x 1=0,22	2,564
86)Molécula 21	21)CBR00146 3-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline CAS No.: 134812-28-5 Peso molecular: 176.24	0,185 x 3=0,555	0,83 x 2=1,626	0,35 x 1=0,35	2,531

87)Molécula 22	22)CBR00254 4-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline CAS No.: 60759-10-6 Peso molecular: 176.24	0,185 x 3=0,555	0,81 x 2=1,62	0,33 x 1=0,33	2,505
88)Molécula 07	7)686360 4-[(Trimethylsilyl)ethynyl]aniline CAS No.: 75867-39-9 Peso molecular: 189.33 Comparar Nº do produto Descrição	não foi possível calcular	0,90 x 2=1,80	0,65 x 1=0,65	2,45
89)Molécula 40	40) CBR01193 2-Methyl-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline CAS No.: 384860-18-8 Peso molecular: 175.19	0,511 x 3=1,533	0,45 x 2=0,9	0,01 x 1=0,01	2,443
90)Molécula 64	64) CDS004111 4-(2-methyl-1,3-thiazol-4-yl)aniline CAS No.: 20021-49-2 Peso molecular: 190.26	0,192 x 3=0,576	0,61 x 2=1,22	0,19 x 1=0,19	1,986
91)Molécula 83	83) TNT00139 2,6-Dibromo-4-(6-methylbenzo[d]thiazol-2-yl)aniline Peso molecular: 398.12	0,279 x 3=0,837	0,49 x 2=0,98	0,06 x 1=0,06	1,877
92)Molécula 75	75) CDS000062 4-[4-(4-fluorophenyl)-1,3-thiazol-2-yl]aniline Peso molecular: 270.32	0,116x3=0,348	0,63 x 2=1,26	0,20 x 1=0,20	1,808

93)Molécula 77	77) OTV000493 3-(6-Methylimidazo[1,2-a]pyridin-2-yl)aniline	0,05 x 3=0,15	0,75 x 2=1,5	0,19 x 1=0,19	1,84
94)Molécula 79	79) OTV000493 3-(6-Methylimidazo[1,2-a]pyridin-2-yl)aniline	0,128 x 3=0,384	0,53 x 2=1,06	0,28 x 1=0,28	1,724
95)Molécula 82	82) TMT00154 4-Chloro-3-(5,7-dimethylbenzo[d]oxazol-2-yl)aniline	0,187x3=0,561	0,40 x 2=0,8	0,18 x 1=0,18	1,544
96)Molécula 86	86) 364797 Disperse Orange 3	0,156 x 3=0,468	0,45 x 2=0,9	0,12 x 1=0,12	1,488
97)Molécula 03	3)429899 2,6-Dichloro-4-(trifluoromethoxy)aniline	não foi possível calcular	0,39 x 2=0,78	0,21 x 1=0,21	0,99
98)Molécula 15	15)28623 4-(Heptadecafluorooctyl)aniline	não foi possível calcular	-0,34 x2= -0,68	-0,36 x 1= -0,36	-1,04