

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
CAMPUS GOVERNADOR VALADARES
INSTITUTO CIÊNCIAS DA VIDA (ICV)
GRADUAÇÃO EM FARMÁCIA

Thaís Santos de Sá

Uso da Bioinformática para selecionar moléculas candidatas a fármacos.

Governador Valadares
2022

Thaís Santos de Sá

Uso da Bioinformática para seleccionar moléculas candidatas a fármacos.

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Instituto Ciências da
Vida da Universidade Federal de Juiz
de Fora, como requisito parcial à
obtenção do bacharelado em Farmácia.

Orientador: Prof. Dr. João Eustáquio Antunes

Governador Valadares

2022

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Santos de Sá, Thaís .
Uso da Bioinformática para selecionar moléculas candidatas a fármacos. / Thaís Santos. -- 2022.
83 f.

Orientador: João Antunes
Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Campus Avançado de Governador Valadares, Faculdade de Farmácia e Bioquímica, 2022.

1. Bioinformática. 2. Descoberta de fármacos. I. Antunes, João, orient. II. Título.

Thaís Santos de Sá

Uso da Bioinformática para selecionar moléculas candidatas a fármacos.

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Ciências da Vida da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial à obtenção do bacharelado em Farmácia.

Aprovada em, 13 de dezembro de 2022

BANCA EXAMINADORA

João Eustáquio Antunes

Prof. Dr. João Eustáquio Antunes (Orientador)
Universidade Federal de Juiz de Fora
Campus Governador Valadares

Michelle Bueno de Moura Pereira Antunes

Prof. Dr. Michelle Bueno de Moura Pereira (Avaliadora)
Universidade Federal de Juiz de Fora
Campus Governador Valadares

Wesley W. Gonçalves Nascimento

Prof. Dr. Wesley William Gonçalves Nascimento (Avaliador)
Universidade Federal de Juiz de Fora
Campus Governador Valadares

Thaís Santos de Sá

Acadêmico (a)

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por ter me sustentado nos momentos difíceis, me permitindo superar as adversidades e, assim, me possibilitando chegar até aqui.

Aos meus amados pais, Cristiane Thaís Santos de Sá e Wagner Silveira de Sá, por todo apoio, carinho, amor e dedicação na minha criação e pelo incentivo nos estudos e nas noites de sono perdidas.

Ao meu irmão, Gabriel, por alegrar e contagiar meus dias.

Aos meus avós por me incentivarem e acreditarem na minha capacidade sempre, com ternura e amor, me ajudando a realizar meus sonhos.

Aos meus amigos e familiares pelo apoio e incentivo durante toda a graduação.

Ao meu orientador, Prof. Dr. João Eustáquio Antunes, pela dedicação, auxílio e apoio durante a realização desse trabalho.

À minha parceira de projeto Tainara, que me auxiliou na realização dos resultados necessários nesse trabalho.

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. Tais ferramentas são plataformas computacionais de fácil acesso e execução. Após a identificação e validação de um alvo farmacológico, por exemplo as 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 problems, an important bottleneck in this process being the ability to reconcile a molecule that is a potent pharmacological inhibitor and that also has its synthesis possible to be carried out. Previous computational studies must be carried out to target molecules with good pharmacokinetic parameters, high biological activity and also a great possibility of being synthesized. Among several computational tools used in the study of new drugs, there are those used to predict pharmacokinetic parameters. Such tools are computational platforms of easy access and execution. After identifying and validating a pharmacological target, for example kinase enzymes in cancer, promising molecules can be designed for this target. If the type of cancer is brain, studies of promising molecules with the ability to cross the blood-brain barrier can contribute significantly. Thus, the objective of this study is to carry out computational studies for the selection of promising molecules for the treatment of brain cancer. To carry out this study, 98 molecules were selected. As a criterion for this selection was, firstly, to evaluate the possibility of synthesizing these molecules. Then computational studies were carried out to evaluate pharmacokinetic parameters, ability to inhibit kinases and to cross the blood-brain barrier. The result obtained in this study allowed the selection of five most promising molecules. Such molecules can be synthesized and tested in in vitro experiments. It can be concluded, therefore, that this study allowed the reduction of a considered high number of proposed molecules to a reduced number of those considered more promising, thus reducing the time and money for the development of promising molecules for the treatment of this type of cancer.

Keywords: Cancer, Development of new drugs, Bioinformatics.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Classificação de moléculas promissoras.....	20
---	----

LISTA DE ANEXOS

Anexo A - Estudo das moléculas.....	25
Anexo B - Capacidade de atravessar barreira hemato-encefálica.	43
Anexo C - Score das moléculas.	63

SUMÁRIO

1	Introdução.....	7
1.1	Etapas para descoberta de novos fármacos.....	8
1.2	Ferramentas para a descoberta de novos fármacos.....	9
1.3	Uso da Bioinformática para a descoberta de novos fármacos.....	10
1.4	Inibidores de quinases.....	11
1.5	Barreira Hematoencefálica.....	12
1.6	Síntese de moléculas orgânicas.....	13
2	Objetivos.....	14
2.1	Objetivo geral.....	14
2.2	Objetivos específicos.....	14
3	Metodologia.....	15
4	Resultados e Discussão.....	17
5	Conclusão.....	21
	REFERÊNCIAS.....	22

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 (ANVISA). 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 causarem 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 farmacoforo 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-anilinoquinazolininas, 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, “psoríase”, 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 Objetivos

2.1 Objetivo geral

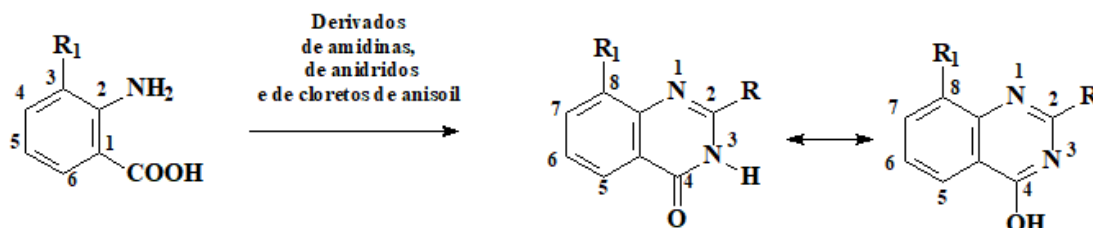
Realizar estudos *in silico* para selecionar moléculas promissoras para serem propostas como novos fármacos para tratamento de câncer cerebral.

2.2 Objetivos específicos

1. Selecionar moléculas com potencial para síntese e com bons parâmetros farmacocinéticos.
2. Selecionar moléculas com potencial capacidade de inibir quinases.
3. Selecionar moléculas com potencial capacidade de atravessar Barreira Hematoencefálica.
4. Propor para síntese as moléculas mais promissoras para um potencial tratamento de câncer cerebral.

3 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-(3H)-quinazolinonas. *Reagentes e condições:* (a) acetato de formamidina, 140°C, 8h; (b) dicloridrato de guanidina; NaOEt, EtOH, 130°C, 5h. (c) dibromidrato de 2-aminoacetamidina, MeOH, 80°C, 6h; (d-e) anidridos acético e benzóico, refluxo, 2h e NH₃; (f-h) (i) Cloreto de *o*, *m*, *p*-anisóila, Et₃N (2 eq), THF, TA, 3h; ii) NH₃; iii) 5% KOH aq, EtOH, refluxo, 1h.

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](https://www.swissadme.ch/)) 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.

2. 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.

3. 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.

4. 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.

4 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 prever 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 conseqüentemente 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).





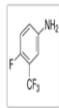
A probabilidade de cada molécula ser considerada um bom inibidor de enzimas também foi avaliada (Anexo C), mas como isso é um parâmetro bastante amplo em relação ao desenvolvimento de novos fármacos para tratamento de câncer, foi atribuído a este parâmetro peso 1. Existem algumas evidências em relação à inibição de enzimas ser importante para o tratamento de câncer, por exemplo, nos casos das enzimas β -glicuronidase e nitroreductase 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	<p>49) CD5014206</p>  <p>3-(1,3-oxazol-5-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₇H₇N₂O CAS No.: 157837-51-5 Peso molecular: 160,17</p>	0,727x 3=2,181	0,94x 2=1,88	0,62x 1=0,62	4,681
2) Molécula 47	<p>47) CBR00968</p>  <p>4-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): C₁₁H₁₄N₂Cl₂ Peso molecular: 248,18</p>	0,934x 3=2,802	0,67 x 2=1,34	0,26 x 1=0,26	4,402
3) Molécula 55	<p>55) CBR01277</p>  <p>3-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): C₁₁H₁₄N₂Cl₂ Peso molecular: 248,18</p>	0,929x 3=2,787	0,67x 2=1,34	0,25x 1=0,25	4,377
4) Molécula 43	<p>43) CD5007538</p>  <p>3-(morpholin-4-ylmethyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₁H₁₃N₂O Peso molecular: 192,26</p>	0,934x 3=2,802	0,66x 2=1,32	0,20x 1=0,20	4,322
5) Molécula 27	<p>27) Z1778</p>  <p>4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)aniline Sinônimo: 3-Amino-2-fluorobenzeno-fluorido, 3,3,3-Trifluoro-4-aminobenzidina Formula Bruta: F₄C₆H₅N CAS No.: 2357-47-3 Peso molecular: 179,11 EC No.: 219-095-7</p>	0,844x 3=2,532	0,74x 2=1,48	0,24x 1=0,24	4,255

Fonte: Elaborada pelo autor. (2022)

5 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 (OH)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. Tyrophostins 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 tirosina 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.



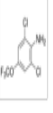
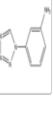

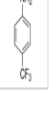
ROJAS, Hugo; RITTER, Cristiane; PIZZOL, Felipe Dal. Mechanisms of dysfunction of the blood-brain barrier in critically ill patients: emphasis on the role of matrix metalloproteinases. **Revista Brasileira de terapia intensiva**, v. 23, p. 222-227, 2011.

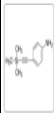
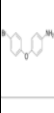
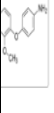

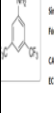

ROSKOSKI JR, Robert. Properties of FDA-approved Small Molecule Protein Kinase Inhibitors: A 2023 Update. **Pharmacological research**, p. 106552, 2022.


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.



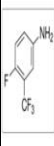
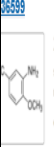
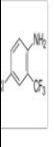
Anexo A - Estudo das moléculas

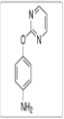
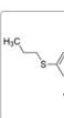

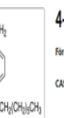

Moléculas	Cálculos das propriedades moleculares	Cálculos das pontuações de bioatividade	Propriedades farmacocinéticas	Propriedades de toxicidade
<p>Produto nº 695408</p>  <p>4-(4-Fluorophenoxy)aniline Epical Fórmula (Mol) Nomeado: C₁₂H₉FO CASNo: 36260-92-4 Precedente: 202,21</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 5,00 TPSA 91,54</p> <p>átoms 30 M 406,42 ão 7 OHNH 3 violações 0 rotb 6 volume 351,24</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,13</p> <p>Modulador de canal iónico -0,15 Inibidor de quinase 0,67 Ligante de receptor nuclear -0,49 Inibidor de protease -0,09 Inibidor de enzima 0,23</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -5,48 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,716 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,512 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,154 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,463 -log mol/kg (1432,095 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>BR01220</p>  <p>4-(Tetrahydrofuran-2-ylmethoxy)aniline Epical Fórmula (Mol) Nomeado: C₁₂H₁₅O₂ CASNo: 92246-62-6 Precedente: 193,24</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,51 TPSA 100,77</p> <p>átoms 29 M 396,45 ão 8 OHNH 3 violações 0 rotb 7 volume 357,08</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,00</p> <p>Modulador de canal iónico -0,35 Inibidor de quinase 0,40 Ligante de receptor nuclear -0,76 Inibidor de protease -0,30 Inibidor de enzima 0,08</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante BBB Não Substrato P-gp sim inibidor de CYP1A2 sim inibidor de CYP2C19 Não inibidor de CYP2C9 Não inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 sim og K_p (permeação da pele) -6,31 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,924 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,394 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,212 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,493 -log mol/kg (1129,427 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>429699</p>  <p>2,6-Dichloro-4-(trifluoromethoxy)aniline Fórmula linear: ClC₆H₃(OCF₃)Cl CASNo: 93479-66-0 Precedente: 246,01</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,86 TPSA 91,54</p> <p>átoms 27 M 425,19 ão 7 OHNH 3 violações 0 rotb 6 volume 313,20</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,13</p> <p>Modulador de canal iónico -0,04 Inibidor de quinase 0,39 Ligante de receptor nuclear -0,29 Inibidor de protease -0,07 Inibidor de enzima 0,21</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -5,52 cm/s</p>	<p>Não foi possível calcular</p>
<p>CB01855</p>  <p>3-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline Epical Fórmula (Mol) Nomeado: C₇H₅N₄ CASNo: 14213-12-0 Precedente: 151,16</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 1,92 TPSA 125,91</p> <p>átoms 27 M 364,37 ão 10 OHNH 3 violações 0 rotb 5 volume 310,22</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,04</p> <p>Modulador de canal iónico -0,71 Inibidor de quinase 0,49 Ligante de receptor nuclear -0,94 Inibidor de protease -0,19 Inibidor de enzima 0,05</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -6,88 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,826 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,612 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,192 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,465 -log mol/kg (1248,94 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>PH016744</p>  <p>3-(4-Chloro-3-ethylphenoxy)aniline Fórmula linear: C₁₂H₁₃ClO CASNo: 262266-19-0</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 6,33 TPSA 91,54</p> <p>átoms 32 M 450,93 ão 7 OHNH 3 violações 1 rotb 7 volume 393,20</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,11</p> <p>Modulador de canal iónico -0,15 Inibidor de quinase 0,53 Ligante de receptor nuclear -0,50 Inibidor de protease -0,13 Inibidor de enzima 0,16</p> <p>Obter dados como texto (para copiar/colar).</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -4,82 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,346 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,398 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,163 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,169 -log mol/kg (920,673 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>224936</p>  <p>4-(Trifluoromethyl)aniline Sinónimo: 4-(trifluorometil)anilina, 4-(trifluorometil)anilina Fórmula linear: CF₃C₆H₄NH₂ CASNo: 455-14-1 Precedente: 151,12 EINECS: 207-226-5 InChIKey: 1544053</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,97 TPSA 82,30</p> <p>átoms 26 M 364,33 ão 6 OHNH 3 violações 0 rotb 5 volume 297,21</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de GPCR 0,18</p> <p>Modulador de canal iónico -0,09 Inibidor de quinase 0,71 Ligante de receptor nuclear -0,54 Inibidor de protease -0,11 Inibidor de enzima 0,24</p> <p>Obter dados como texto (para copiar/colar).</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -5,75 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,79 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,48 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,146 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,389 -log mol/kg (1148,718 mg/kg) > 500 mg/kg</p>




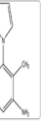
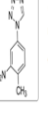
<p>766360</p> <p>4-(Trimethylsilyl)ethynylaniline</p> <p>Empírica Fórmula (Molecular): $C_{12}H_{15}Si$</p> <p>CAS No.: 75937-19-9 Peso molecular: 189,33</p>  <p>Comparar: MP, Apólio, Descrição</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 5.21</p> <p>TPSA 82.30</p> <p>átomos 28</p> <p>PM 392,54</p> <p>átomos 6</p> <p>OH/NH 3</p> <p>violações 1</p> <p>rotb 4</p> <p>volume 367,29</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,62</p> <p>Modulador de canal iônico 0,49</p> <p>Inibidor de quinase 0,90</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,53</p> <p>Inibidor de protease 0,28</p> <p>Inibidor de enzima 0,65</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 Não</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,00 cm/s</p>	<p>Não foi possível calcular</p>
<p>695394</p> <p>4-(4-Bromophenoxy)aniline</p> <p>Empírica Fórmula (Molecular): $C_{12}H_{11}BrO$</p> <p>CAS No.: 31465-95-7 Peso molecular: 244,12</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 5.64</p> <p>TPSA 91.54</p> <p>átomos 30</p> <p>PM 467,32</p> <p>átomos 7</p> <p>OH/NH 3</p> <p>violações 1</p> <p>rotb 6</p> <p>volume 364,19</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,04</p> <p>Modulador de canal iônico -0,20</p> <p>Inibidor de quinase 0,60</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,61</p> <p>Inibidor de protease -0,17</p> <p>Inibidor de enzima 0,18</p> <p>Clique aqui para copiar o texto</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,44 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,91</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,508</p> <p>SenSen (sensibilização da pele) --- 0,171</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,702 -log mol/kg (938,148 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>6901173</p> <p>4-(2-Methoxyphenoxy)aniline</p> <p>Empírica Fórmula (Molecular): $C_{12}H_{13}O_2$</p> <p>CAS No.: 13666-01-6 Peso molecular: 215,25</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 4,89</p> <p>TPSA 100,77</p> <p>átomos 31</p> <p>PM 418,45</p> <p>átomos 8</p> <p>OH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 7</p> <p>volume 371,85</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,12</p> <p>Modulador de canal iônico -0,14</p> <p>Inibidor de quinase 0,61</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,49</p> <p>Inibidor de protease -0,07</p> <p>Inibidor de enzima 0,23</p> <p>Clique aqui para copiar o texto</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,65 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) + 0,692</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,682</p> <p>SenSen (sensibilização da pele) --- 0,165</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,501 -log mol/kg (1330,221 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>695386</p> <p>4-(4-Chlorophenoxy)aniline</p> <p>Empírica Fórmula (Molecular): $C_{12}H_{11}ClO$</p> <p>CAS No.: 101-79-1 Peso molecular: 215,67</p> <p>EC No.: 202-794-5</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 5.51</p> <p>TPSA 91.54</p> <p>átomos 30</p> <p>PM 422,87</p> <p>átomos 7</p> <p>OH/NH 3</p> <p>violações 1</p> <p>rotb 6</p> <p>volume 359,84</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,12</p> <p>Modulador de canal iônico -0,14</p> <p>Inibidor de quinase 0,63</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,53</p> <p>Inibidor de protease -0,10</p> <p>Inibidor de enzima 0,21</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,21 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,904</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,492</p> <p>SenSen (sensibilização da pele) --- 0,169</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,569 -log mol/kg (1140,796 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>193136</p> <p>3,5-Bis(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Empírica Fórmula (Molecular): $C_{12}F_7N$</p> <p>CAS No.: 339-74-5 Peso molecular: 225,12</p> <p>EC No.: 200-355-0 Biotóxico: 654103</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 4.80</p> <p>TPSA 82.30</p> <p>átomos 30</p> <p>PM 432,32</p> <p>átomos 6</p> <p>OH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 6</p> <p>volume 328,51</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,16</p> <p>Modulador de canal iônico -0,08</p> <p>Inibidor de quinase 0,62</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,46</p> <p>Inibidor de protease -0,09</p> <p>Inibidor de enzima 0,21</p>	<p>bsorção GI Baixo</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,54 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) + 0,682</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,48</p> <p>SenSen (sensibilização da pele) --- 0,146</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,64 -log mol/kg (990,397 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>650080</p> <p>4-(Thiophen-3-yl)aniline</p> <p>Empírica Fórmula (Molecular): $C_{12}H_9S$</p> <p>CAS No.: 834884-74-1 Peso molecular: 175,25</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 4.46</p> <p>TPSA 82.30</p> <p>átomos 27</p> <p>PM 378,46</p> <p>átomos 6</p> <p>OH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>volume 328,03</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,19</p> <p>Modulador de canal iônico -0,09</p> <p>Inibidor de quinase 0,85</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,56</p> <p>Inibidor de protease -0,07</p> <p>Inibidor de enzima 0,31</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,54 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,896</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,65</p> <p>SenSen (sensibilização da pele) --- 0,189</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,332 -log mol/kg (1111,774 mg/kg) > 500 mg/kg</p>


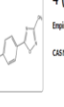
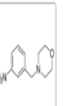

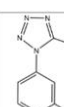
<p>3CBR00248</p>  <p>4-(Pyridin-3-yloxy)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{12}H_{10}N_2O$ CAS No.: 80650-45-9 Peso molecular: 198.21</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 3,76 TPSA 104,43 átomos 29 M 389,42 ão 8 OH/NH 3 violações 0 nrotb 6 Volume 342,15</p>	<p>Intuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,22 Modulador de canal iônico -0,02 Inibidor de quinase 0,86 Ligante de receptor nuclear -0,51 Inibidor de protease -0,01 Inibidor de enzima 0,33</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -6,21 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,88 AMES (Mutagenicidade de Ames) ++ 0,708 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,771 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,516 -log mol/kg (1186,896 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>4KOB0081</p>  <p>4-(Phenylsulfonyl)methyl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{14}H_{13}N_2S$ CAS No.: 13730-70-0 Peso molecular: 253,31</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 5,11 TPSA 82,30 átomos 30 M 418,52 ão 6 OH/NH 3 violações 1 nrotb 7 Volume 372,25</p>	<p>Intuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,01 Modulador de canal iônico -0,35 Inibidor de quinase 0,46 Ligante de receptor nuclear -0,60 Inibidor de protease -0,12 Inibidor de enzima 0,19</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -5,29 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,854 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,532 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,187 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,559 -log mol/kg (1158,026 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>520632</p>  <p>4-(Heptadecafluorooctyl)aniline Sinalizador: 4-Perfluorocetila Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{24}H_{17}F_{17}$ CAS No.: 83766-52-3 Peso molecular: 511,18</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 8,38 TPSA 82,30 átomos 47 M 714,38 ão 6 OH/NH 3 violações 2 nrotb 12 Volume 481,77</p>	<p>Intuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR -0,21 Modulador de canal iônico -1,03 Inibidor de quinase -0,34 Ligante de receptor nuclear -0,95 Inibidor de protease 0,01 Inibidor de enzima -0,36</p>	<p>bsorção GI Baixo ermeante 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 og K_p (permeação da pele) cm/s</p>	<p>Não foi possível calcular</p>
<p>5481920</p>  <p>4-(Trifluoromethylsulfonyl)aniline Fórmula linear: $C_9H_7F_3SO_2N$ CAS No.: 479-27-0 Peso molecular: 225,19</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 5,50 TPSA 116,44 átomos 29 M 428,39 ão 8 OH/NH 3 violações 1 nrotb 6 Volume 328,64</p>	<p>Intuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,12 Modulador de canal iônico -0,13 Inibidor de quinase 0,48 Ligante de receptor nuclear -0,59 Inibidor de protease 0,04 Inibidor de enzima 0,33</p>	<p>bsorção GI Baixo ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -6,46 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,812 AMES (Mutagenicidade de Ames) --- 0,234 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,187 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,994 -log mol/kg (434,352 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>566446</p>  <p>3-(Difluoromethoxy)aniline Fórmula linear: $C_8H_8F_2O$ CAS No.: 22234-08-4 Peso molecular: 158,13</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 3,67 TPSA 91,54 átomos 26 M 362,34 ão 7 OH/NH 3 violações 0 nrotb 6 Volume 301,59</p>	<p>Intuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR -0,03 Modulador de canal iônico -0,35 Inibidor de quinase 0,46 Ligante de receptor nuclear -0,81 Inibidor de protease -0,63 Inibidor de enzima 0,20</p>	<p>Não foi possível calcular</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,866 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,564 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,147 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,246 -log mol/kg (2056,418 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>8222100</p>  <p>4-(Hexyloxy)aniline Fórmula linear: $C_{12}H_{16}O$ CAS No.: 39905-57-2 Peso molecular: 182,23 EINECS: 254-496-8</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>LogP 5,58 TPSA 91,54 átomos 29 M 396,49 ão 7 OH/NH 3 violações 1 nrotb 10 Volume 375,47</p>	<p>Intuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>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</p>	<p>bsorção GI Alto ermeante 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 og K_p (permeação da pele) -4,94 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,938 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,236 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,238 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,51 -log mol/kg (1225,274 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

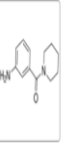


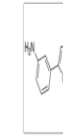
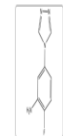
<p>4-(Trifluoromethoxy)aniline</p> <p>Símbolo: <chem>Cc1ccc(OC(F)(F)F)cc1</chem></p> <p>Fórmula linear: <chem>Cc1ccc(OC(F)(F)F)cc1</chem></p> <p>CASNo: 461-02-5 Peso molecular: 177,12</p> <p>ECNo: 207-327-5 Referência: 2090209</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>QLogP 4,05</p> <p>TPSA 91,54</p> <p>átomos 27</p> <p>MW 380,33</p> <p>átomos 7</p> <p>OHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 6</p> <p>Volume 306,20</p>	<p>Quantuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,17</p> <p>Modulador de canal iônico -0,04</p> <p>Inibidor de quinase 0,62</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,47</p> <p>Inibidor de protease -0,03</p> <p>Inibidor de enzima 0,24</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>log K_p (permeação da pele) -5,65 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) - 0,412</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,454</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,135</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 3,097 -log mol/kg (304,188 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>4-(Thiophen-2-yl)aniline</p> <p>Símbolo: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=CC=CC=C2</chem></p> <p>Fórmula linear: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=CC=CC=C2</chem></p> <p>CASNo: 70010-40-9 Peso molecular: 175,23</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>QLogP 4,46</p> <p>TPSA 82,30</p> <p>átomos 27</p> <p>MW 378,46</p> <p>átomos 6</p> <p>OHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>Volume 328,03</p>	<p>Quantuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,19</p> <p>Modulador de canal iônico -0,09</p> <p>Inibidor de quinase 0,85</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,56</p> <p>Inibidor de protease -0,07</p> <p>Inibidor de enzima 0,31</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>log K_p (permeação da pele) -5,54 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,896</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,65</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,189</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,532 -log mol/kg (1011,774 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>3-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline</p> <p>Símbolo: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=NC=CC=S2</chem></p> <p>Fórmula linear: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=NC=CC=S2</chem></p> <p>CASNo: 14812-29-5 Peso molecular: 176,24</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>QLogP 3,66</p> <p>TPSA 95,19</p> <p>átomos 27</p> <p>MW 379,44</p> <p>átomos 7</p> <p>OHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>Volume 323,88</p>	<p>Quantuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,16</p> <p>Modulador de canal iônico -0,16</p> <p>Inibidor de quinase 0,83</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,66</p> <p>Inibidor de protease -0,01</p> <p>Inibidor de enzima 0,35</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>log K_p (permeação da pele) -5,99 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,926</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,642</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,201</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,539 -log mol/kg (1066,854 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>4-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline</p> <p>Símbolo: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=NC=CC=S2</chem></p> <p>Fórmula linear: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=NC=CC=S2</chem></p> <p>CASNo: 60759-10-6 Peso molecular: 176,24</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>QLogP 3,68</p> <p>TPSA 95,19</p> <p>átomos 27</p> <p>MW 379,44</p> <p>átomos 7</p> <p>OHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>Volume 323,88</p>	<p>Quantuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,16</p> <p>Modulador de canal iônico -0,16</p> <p>Inibidor de quinase 0,81</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,66</p> <p>Inibidor de protease -0,02</p> <p>Inibidor de enzima 0,33</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>log K_p (permeação da pele) -5,99 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,882</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,642</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,201</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,53 -log mol/kg (1039,822 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline</p> <p>Símbolo: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=NC3=CC=NC=C3N2</chem></p> <p>Fórmula linear: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=NC3=CC=NC=C3N2</chem></p> <p>CASNo: 53708-30-0 Peso molecular: 202,25</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>QLogP 3,91</p> <p>TPSA 100,13</p> <p>átomos 31</p> <p>MW 412,45</p> <p>átomos 8</p> <p>OHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>Volume 362,52</p>	<p>Quantuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,18</p> <p>Modulador de canal iônico 0,01</p> <p>Inibidor de quinase 0,74</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,57</p> <p>Inibidor de protease -0,06</p> <p>Inibidor de enzima 0,24</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>log K_p (permeação da pele) -5,84 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,842</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,664</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,183</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,571 -log mol/kg (1007,578 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>2-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Símbolo: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=NC=NC=N2</chem></p> <p>Fórmula linear: <chem>Nc1ccc(cc1)C2=NC=NC=N2</chem></p> <p>CASNo: 14210-53-6 Peso molecular: 161,16</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>QLogP 1,90</p> <p>TPSA 125,91</p> <p>átomos 27</p> <p>MW 364,37</p> <p>átomos 10</p> <p>OHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>Volume 310,22</p>	<p>Quantuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,03</p> <p>Modulador de canal iônico -0,61</p> <p>Inibidor de quinase 0,47</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,93</p> <p>Inibidor de protease -0,18</p> <p>Inibidor de enzima -0,02</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>Inibidor de CYP2C9 Não</p> <p>Inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>log K_p (permeação da pele) -6,88 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,876</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,612</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,192</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,462 -log mol/kg (1289,857 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

<p>53BR00263</p> <p>4-(1H-Tetrazol-5-yloxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): $C_7H_7N_5O$</p> <p>CAS No.: 467226-44-4 Pseudo molecular: 177.16</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP -0,71 TPSA 148,49</p> <p>atoms 28 PM 382,38 não 11 nOH/NH 6 nviolações 2 nrotb 6 volume 324,52</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>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</p>	<p>absorção GI ● Baixo 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 $\log K_p$ (permeação da pele) -6,86 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) - 0,432 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,508 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,257 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 3,061 -log mol/kg (332,277 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>561274</p> <p>3-Chloro-4-(4-chlorophenoxy)aniline</p> <p>Formula linear: $C_9H_7Cl_2O$</p> <p>CAS No.: 2490-79-6 Pseudo molecular: 254.11 EC No.: 246-519-8</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 6.12 TPSA 91.54</p> <p>atoms 31 MW 457,32 não 7 nOH/NH 3 nviolações 1 nrotb 6 volume 373,38</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>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 0,20</p>	<p>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 ● sim $\log K_p$ (permeação da pele) -4,97 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,866 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,492 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,169 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,677 -log mol/kg (463,044 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>217778</p> <p>4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Sinônimo(s): 3-Amino-2-fluorobenzenofluore, 3,3,3-Trifluoro-2-anilina</p> <p>Formula linear: $C_7H_5F_4N$</p> <p>CAS No.: 2357-47-3 Pseudo molecular: 179.11 EC No.: 219-095-7</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 4.07 TPSA 82.30</p> <p>atoms 27 MW 382,32 não 6 nOH/NH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 302,14</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,23 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</p>	<p>Não foi possível calcular</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,886 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,454 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,152 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,653 -log mol/kg (650,009 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>53BR00381</p> <p>4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{12}H_{10}N_2$</p> <p>CAS No.: 52708-36-8 Pseudo molecular: 209.25</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3.91 TPSA 100.13</p> <p>atoms 31 MW 412,45 não 8 nOH/NH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 362,52</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>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</p>	<p>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) -5,84 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,842 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,664 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,183 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,571 -log mol/kg (1007,576 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>38599</p> <p>2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Sinônimo(s): 4-Metoxi-3-(trifluorometil)anilina</p> <p>Formula linear: $C_9H_7F_3O$</p> <p>CAS No.: 349-65-5 Pseudo molecular: 191.15</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,96 TPSA 91,54</p> <p>atoms 28 PM 394,35 não 7 nOH/NH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 322,76</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>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</p>	<p>absorção GI ● Alto permeante BBB ● Não Substrato P-gp ● Não Inibidor de CYP1A2 ● sim Inibidor de CYP2C19 ● sim Inibidor de CYP2C9 ● Não Inibidor de CYP2D6 ● sim Inibidor de CYP3A4 ● sim $\log K_p$ (permeação da pele) -5,96 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,86 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,43 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,126 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,316 -log mol/kg (1004,957 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>217777</p> <p>4-Chloro-2-(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Sinônimo(s): 4-Cloro-2-(trifluorometil)anilina, 2-Amino-3-clorobenzenofluore</p> <p>Formula linear: $C_7H_5ClF_3N$</p> <p>CAS No.: 445-03-4 Pseudo molecular: 195.57 EC No.: 207-551-3</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 4,58 TPSA 82,30</p> <p>atoms 27 MW 398,77 não 6 nOH/NH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 310,75</p>	<p>Contuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>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</p>	<p>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) -5,52 cm/s</p>	<p>HT (Hepatotoxicidade Humana) + 0,66 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,41 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,154 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,832 -log mol/kg (807,117 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

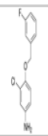

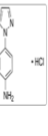

<p>31) CDS006360</p>  <p>4-(2-Pyrimidinyl)oxy)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): C₁₂H₉N₃O Peso molecular: 187,20</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,01 TPSA 117,32</p> <p>atoms 29 MW 390,40 não 9 nOHNH 3 nviolacões 0 nrotb 6 volume 337,99</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,22</p> <p>Modulador de canal iônico -0,21</p> <p>Inibidor de quinase 0,80</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,54</p> <p>Inibidor de protease -0,05</p> <p>Inibidor de enzima 0,34</p>	<p>Bi 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) -6.44 cm/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) + 0.688 HT (Human Hepatotoxicity) ++ 0.804 AMES (Ames Mutagenicity) + 0.525 SkinSen (Skin sensitization) --- 0.157 D50 (LD50 of acute toxicity) 2.575 -log mol/kg (1038.735 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>32) CBR01435</p>  <p>4-(Propylthio)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): C₁₀H₁₁N Peso molecular: 151,20</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 4,39 TPSA 82,30</p> <p>atoms 26 MW 370,48 não 6 nOHNH 3 nviolacões 0 nrotb 7 volume 334,21</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,05</p> <p>Modulador de canal iônico -0,30</p> <p>Inibidor de quinase 0,45</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,71</p> <p>Inibidor de protease -0,14</p> <p>Inibidor de enzima 0,20</p>	<p>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) -5,0</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0.886 HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0.914 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0.396 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0.211 D50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.566 -log mol/kg (1008.701 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>33) CBR00024</p>  <p>4-[(1-Methylpiperidin-4-yl)oxy]aniline Empirical Formula (Molecular Weight): C₁₇H₂₃N₂O CAS No.: 350789-72-7 Peso molecular: 278,38</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2,82 TPSA 94,77</p> <p>atoms 30 MW 409,49 não 8 nOHNH 3 nviolacões 0 nrotb 6 volume 377,44</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,26</p> <p>Modulador de canal iônico -0,07</p> <p>Inibidor de quinase 0,69</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,59</p> <p>Inibidor de protease 0,01</p> <p>Inibidor de enzima 0,30</p>	<p>Bi absorption High BBB permeant No P-gp substrate Yes CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor Yes CYP2C9 inhibitor Yes CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes log K_p (skin permeation) -6.26 cm/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) +++ 0.92 HT (Human Hepatotoxicity) +++ 0.956 AMES (Ames Mutagenicity) - 0.41 SkinSen (Skin sensitization) --- 0.258 D50 (LD50 of acute toxicity) 2.497 -log mol/kg (1038.897 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>34) CB40006</p>  <p>4-(HEPTYLOXY)ANILINE Empirical Formula (Molecular Weight): C₁₄H₁₇N CAS No.: 3995-44-7 Peso molecular: 205,26</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 6,09 TPSA 91,54</p> <p>atoms 30 MW 410,52 não 7 nOHNH 3 nviolacões 1 nrotb 11 volume 392,27</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,15</p> <p>Modulador de canal iônico -0,17</p> <p>Inibidor de quinase 0,54</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,50</p> <p>Inibidor de protease -0,08</p> <p>Inibidor de enzima 0,24</p>	<p>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/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0.868 HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0.92 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0.336 SkinSen (sensibilização da pele) --- 0.238 D50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.481 -log mol/kg (1038.228 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>35) ST04121</p>  <p>2-BENZYLTHIO)ANILINE Empirical Formula (Molecular Weight): C₁₅H₁₃S CAS No.: 6325-92-4 Peso molecular: 215,29</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 5,00 TPSA 82,30</p> <p>atoms 29 MW 404,50 não 6 nOHNH 3 nviolacões 0 nrotb 6 volume 355,45</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,15</p> <p>Modulador de canal iônico -0,27</p> <p>Inibidor de quinase 0,57</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,66</p> <p>Inibidor de protease -0,14</p> <p>Inibidor de enzima 0,28</p>	<p>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/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) +++ 0.908 HT (Human Hepatotoxicity) +++ 0.9 AMES (Ames Mutagenicity) + 0.544 SkinSen (Skin sensitization) --- 0.183 D50 (LD50 of acute toxicity) 2.535 -log mol/kg (1080.085 mg/kg) > 500 mg/kg</p>






<p>36)</p> <p>CBR00266</p>  <p>3-(5-Methyl-1H-tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): C₉H₉N₄</p> <p>CAS No.: 500761-24-4 Pseudo molecular: 175,19</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2,01</p> <p>TPSA 125,91</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 378,40</p> <p>ção 10</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>volume 326,78</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,08</p> <p>Modulador de canal iônico -0,54</p> <p>Inibidor de quinase 0,36</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,99</p> <p>Inibidor de protease -0,26</p> <p>Inibidor de enzima 0,06</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>Log K_p (permeação da pele) -6,68 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) + 0,656</p> <p>h-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,836</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,568</p> <p>skinSen (sensibilização da pele) --- 0,087</p> <p>DD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,521 -log mol/kg (1040,109 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>37)</p> <p>CBR00344</p>  <p>3-Methoxy-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): C₉H₉N₄O</p> <p>CAS No.: 802291-40-1 Pseudo molecular: 191,19</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2,14</p> <p>TPSA 135,15</p> <p>atoms 29</p> <p>MW 394,39</p> <p>ção 11</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 1</p> <p>rotb 6</p> <p>volume 335,77</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,02</p> <p>Modulador de canal iônico -0,70</p> <p>Inibidor de quinase 0,45</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,87</p> <p>Inibidor de protease -0,20</p> <p>Inibidor de enzima 0,03</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>Log K_p (permeação da pele) -7,09 cm/s</p>	<p>ERG (ERG Blockers) + 0,568</p> <p>h-HT (Human Hepatotoxicity) ++ 0,794</p> <p>AMES (Ames Mutagenicity) + 0,558</p> <p>skinSen (Skin sensitization) --- 0,193</p> <p>DD50 (LD50 of acute toxicity) 2,525 -log mol/kg (1077,42 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>38)</p> <p>CBR00087</p>  <p>4-(2-Morpholin-4-yl-2-oxoethyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): C₁₂H₁₄N₂O₂</p> <p>CAS No.: 74070-09-2 Pseudo molecular: 236,27</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2,33</p> <p>TPSA 121,08</p> <p>atoms 32</p> <p>MW 439,47</p> <p>ção 10</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 7</p> <p>volume 388,82</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,06</p> <p>Modulador de canal iônico -0,30</p> <p>Inibidor de quinase 0,45</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,69</p> <p>Inibidor de protease -0,11</p> <p>Inibidor de enzima 0,06</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>Inibidor de CYP1A2 Não</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>Log K_p (permeação da pele) -7,46 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,766</p> <p>h-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,916</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,316</p> <p>skinSen (sensibilização da pele) --- 0,185</p> <p>DD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,486 -log mol/kg (1455,262 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>39)</p> <p>CBR00524</p>  <p>2-Methyl-3-(1H-pyrrol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): C₁₀H₁₀N₂</p> <p>CAS No.: 137852-75-1 Pseudo molecular: 172</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,90</p> <p>TPSA 87,24</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 375,43</p> <p>ção 7</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>volume 339,25</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,08</p> <p>Modulador de canal iônico -0,12</p> <p>Inibidor de quinase 0,55</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,84</p> <p>Inibidor de protease -0,28</p> <p>Inibidor de enzima 0,11</p>	<p>GI absorption High</p> <p>BB permeant No</p> <p>P-gp substrate No</p> <p>CYP1A2 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C19 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C9 inhibitor Yes</p> <p>CYP2D6 inhibitor Yes</p> <p>CYP3A4 inhibitor Yes</p> <p>Log K_p (skin permeation) -5,91 cm/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) ++ 0,842</p> <p>h-HT (Human Hepatotoxicity) ++ 0,886</p> <p>AMES (Ames Mutagenicity) + 0,652</p> <p>skinSen (Skin sensitization) --- 0,17</p> <p>DD50 (LD50 of acute toxicity) 2,536 -log mol/kg (1044,277 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>40)</p> <p>CBR01393</p>  <p>2-Methyl-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): C₉H₉N₄</p> <p>CAS No.: 384860-18-0 Pseudo molecular: 175,19</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2,32</p> <p>TPSA 125,91</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 378,40</p> <p>ção 10</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>volume 326,78</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR -0,01</p> <p>Modulador de canal iônico -0,73</p> <p>Inibidor de quinase 0,45</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,93</p> <p>Inibidor de protease -0,24</p> <p>Inibidor de enzima 0,01</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>Log K_p (permeação da pele) -6,71 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) + 0,656</p> <p>h-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,85</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,568</p> <p>skinSen (sensibilização da pele) --- 0,087</p> <p>DD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,524 -log mol/kg (1032,051 mg/kg) > 500 mg/kg</p>





<p>31)</p> <p>CBR00158</p>  <p>3-(2,5-Dimethyl-1H-pyrrol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{11}H_{13}N$</p> <p>CAS No.: 20725-53-8 Ponderal: 156,25</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspiration v2021.10</p> <p><u>miLogP</u> 3,97</p> <p><u>TPSA</u> 87,24</p> <p>atoms 29</p> <p>MW 389,46</p> <p>não 7</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p><u>volume</u> 355,81</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03</u> Ligante de</p> <p>GPCR 0,03</p> <p>Modulador de canal iônico -0,34</p> <p>Inibidor de quinase 0,45</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,88</p> <p>Inibidor de protease -0,29</p> <p>Inibidor de enzima 0,02</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>Log K_p (permeação da pele) -5,69 cm/s</p>	<p>ERG (ERG Blockers) ++ 0,872</p> <p>HT (Human Hepatotoxicity) +++ 0,9</p> <p>AMES (Ames Mutagenicity) + 0,652</p> <p>SkinSen (Skin sensitization) --- 0,17</p> <p>LD50 (LD50 of acute toxicity) 2,554 -log mol/kg (0,087,581 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>32)</p> <p>SR00158</p>  <p>4-(3-Methyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{11}H_{10}N_2O$</p> <p>CAS No.: 78075-21-9 Ponderal: 175,19</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspiration v2021.10</p> <p><u>miLogP</u> 2,84</p> <p><u>TPSA</u> 121,23</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 378,39</p> <p>não 9</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p><u>volume</u> 327,14</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03</u> Ligante de</p> <p>GPCR 0,16</p> <p>Modulador de canal iônico -0,11</p> <p>Inibidor de quinase 0,55</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,56</p> <p>Inibidor de protease -0,16</p> <p>Inibidor de enzima 0,22</p>	<p>GI absorption High</p> <p>BBB permeant No</p> <p>P-gp substrate No</p> <p>CYP1A2 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C19 inhibitor No</p> <p>CYP2C9 inhibitor Yes</p> <p>CYP2D6 inhibitor Yes</p> <p>CYP3A4 inhibitor Yes</p> <p>Log K_p (skin permeation) -6,27 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores ERG) + 0,654</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,91</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,54</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,205</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,538 -log mol/kg (1,096,332 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>33)</p> <p>DS007558</p>  <p>3-(morpholin-4-ylmethyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{12}H_{16}N_2O$</p> <p>Ponderal: 192,26</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspiration v2021.10</p> <p><u>miLogP</u> 2,71</p> <p><u>TPSA</u> 94,77</p> <p>atoms 29</p> <p>MW 395,46</p> <p>não 8</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 6</p> <p><u>volume</u> 360,85</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03</u> Ligante de</p> <p>GPCR 0,15</p> <p>Modulador de canal iônico -0,20</p> <p>Inibidor de quinase 0,66</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,68</p> <p>Inibidor de protease -0,08</p> <p>Inibidor de enzima 0,20</p>	<p>GI absorption High</p> <p>BBB permeant No</p> <p>P-gp substrate Yes</p> <p>CYP1A2 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C19 inhibitor No</p> <p>CYP2C9 inhibitor No</p> <p>CYP2D6 inhibitor Yes</p> <p>CYP3A4 inhibitor Yes</p> <p>Log K_p (skin permeation) -6,96 cm/s</p>	<p>ERG (ERG Blockers) ++ 0,656</p> <p>HT (Human Hepatotoxicity) +++ 0,96</p> <p>AMES (Ames Mutagenicity) - 0,422</p> <p>SkinSen (Skin sensitization) --- 0,242</p> <p>LD50 (LD50 of acute toxicity) 2,532 -log mol/kg (1,061,732 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>34)</p> <p>CBR00754</p>  <p>4-(2-Furyl)aniline hydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{10}H_{10}NO$</p> <p>Ponderal: 195,65</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspiration v2021.10</p> <p><u>miLogP</u> 4,02</p> <p><u>TPSA</u> 95,44</p> <p>atoms 27</p> <p>MW 362,39</p> <p>não 7</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p><u>volume</u> 318,89</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03</u> Ligante de</p> <p>GPCR 0,08</p> <p>Modulador de canal iônico -0,30</p> <p>Inibidor de quinase 0,60</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,74</p> <p>Inibidor de protease -0,27</p> <p>Inibidor de enzima 0,16</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>Log K_p (permeação da pele) -5,86 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores ERG) + 0,692</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,904</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,568</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,178</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 1,966 -log mol/kg (1,964,418 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>35)</p> <p>CBR00266</p>  <p>3-(5-Methyl-1H-imidazol-2-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{11}H_{12}N_2$</p> <p>CAS No.: 5</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspiration v2021.10</p> <p><u>miLogP</u> 2,01</p> <p><u>TPSA</u> 125,91</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 378,40</p> <p>não 10</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p><u>volume</u> 326,78</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03</u> Ligante de</p> <p>GPCR 0,08</p> <p>Modulador de canal iônico -0,54</p> <p>Inibidor de quinase 0,36</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,99</p> <p>Inibidor de protease -0,26</p> <p>Inibidor de enzima 0,06</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>Log K_p (permeação da pele) -6,68 cm/s</p>	<p>ERG (ERG Blockers) + 0,656</p> <p>HT (Human Hepatotoxicity) ++ 0,836</p> <p>AMES (Ames Mutagenicity) + 0,568</p> <p>SkinSen (Skin sensitization) --- 0,187</p> <p>LD50 (LD50 of acute toxicity) 2,921 -log mol/kg (1,140,319 mg/kg) > 500 mg/kg</p>







<p>46)</p> <p>Molinspiration</p> <p>3-(1-piperidinylcarbonyl)aniline</p> <p>Formula linear: $C_{17}H_{21}N_2O$</p> <p>Peso molecular: 274,274</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2.93</p> <p>TPSA 102.61</p> <p>atoms 30</p> <p>MW 407,47</p> <p>não 8</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>robtb 5</p> <p>volume 370,85</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,18</p> <p>Modulador de canal iônico -0,19</p> <p>Inibidor de quinase 0,57</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,67</p> <p>Inibidor de protease -0,05</p> <p>Inibidor de enzima 0,20</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>Inibidor de CYP1A2 Não</p> <p>Inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>$\log K_p$ (permeação da pele) -6,43 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) +++ 0,908</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,964</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,436</p> <p>skinSen (sensibilização da pele) --- 0,2</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,532 -log mol/kg (1197,016 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>47)</p> <p>CSB00895</p> <p>4-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{10}H_{14}N_2$</p> <p>Peso molecular: 249,10</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3.29</p> <p>TPSA 85.54</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 379,46</p> <p>não 7</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>robtb 6</p> <p>volume 351,87</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,23</p> <p>Modulador de canal iônico -0,11</p> <p>Inibidor de quinase 0,67</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,65</p> <p>Inibidor de protease 0,01</p> <p>Inibidor de enzima 0,26</p>	<p>GI absorption High</p> <p>BBB permeant No</p> <p>P-gp substrate Yes</p> <p>CYP1A2 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C19 inhibitor No</p> <p>CYP2C9 inhibitor Yes</p> <p>CYP2D6 inhibitor Yes</p> <p>CYP3A4 inhibitor Yes</p> <p>$\log K_p$ (skin permeation) -6,25 cm/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) +++ 0,904</p> <p>HT (Human Hepatotoxicity) ++ 0,872</p> <p>AMES (Ames Mutagenicity) + 0,506</p> <p>skinSen (Skin sensitization) --- 0,277</p> <p>LD50 (LD50 of acute toxicity) 2,968 -log mol/kg (1026,855 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>48)</p> <p>PBI16885</p> <p>2-[5-(3,4-Dichlorophenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl]aniline</p> <p>Formula linear: $C_{16}H_{10}Cl_2N_2$</p> <p>CAS#: 17529-96-5</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 6.10</p> <p>TPSA 121.23</p> <p>atoms 35</p> <p>MW 509,35</p> <p>não 9</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violations 2</p> <p>robtb 6</p> <p>volume 409,06</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,01</p> <p>Modulador de canal iônico -0,37</p> <p>Inibidor de quinase 0,41</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,66</p> <p>Inibidor de protease -0,13</p> <p>Inibidor de enzima 0,19</p>	<p>GI absorption Low</p> <p>BBB permeant No</p> <p>P-gp substrate No</p> <p>CYP1A2 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C19 inhibitor No</p> <p>CYP2C9 inhibitor Yes</p> <p>CYP2D6 inhibitor Yes</p> <p>CYP3A4 inhibitor Yes</p> <p>$\log K_p$ (skin permeation) -5,56 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,744</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,794</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,372</p> <p>skinSen (sensibilização da pele) --- 0,389</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 3,282 -log mol/kg (1276,624 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>49)</p> <p>COSY4206</p> <p>3-(1,3-oxazol-5-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_9H_8N_2O$</p> <p>CAS#: 157837-91-5</p> <p>Peso molecular: 180,17</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3.26</p> <p>TPSA 108.33</p> <p>atoms 27</p> <p>MW 363,38</p> <p>não 8</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>robtb 5</p> <p>volume 314,73</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,22</p> <p>Modulador de canal iônico -0,10</p> <p>Inibidor de quinase 0,94</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,58</p> <p>Inibidor de protease -0,13</p> <p>Inibidor de enzima 0,62</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>permeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>Inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>Inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>Inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>Inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>Inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>$\log K_p$ (permeação da pele) -6,32 cm/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) + 0,67</p> <p>HT (Human Hepatotoxicity) +++ 0,95</p> <p>AMES (Ames Mutagenicity) + 0,504</p> <p>skinSen (sensibilização da pele) --- 0,359</p> <p>LD50 (LD50 of acute toxicity) 2,49 -log mol/kg (1175,865 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>50)</p> <p>CSB00066</p> <p>2-Fluoro-5-(4H-1,2,4-triazol-4-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_9H_7FN_4$</p> <p>CAS#: 106206-13-9</p> <p>Peso molecular: 176,17</p> 	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2.18</p> <p>TPSA 113.02</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 381,37</p> <p>não 9</p> <p>nOHNH 3</p> <p>violações 0</p> <p>robtb 5</p> <p>volume 319,31</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,13</p> <p>Modulador de canal iônico -0,29</p> <p>Inibidor de quinase 0,56</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,84</p> <p>Inibidor de protease -0,29</p> <p>Inibidor de enzima 0,06</p>	<p>GI absorption High</p> <p>BBB permeant No</p> <p>P-gp substrate Yes</p> <p>CYP1A2 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C19 inhibitor No</p> <p>CYP2C9 inhibitor Yes</p> <p>CYP2D6 inhibitor Yes</p> <p>CYP3A4 inhibitor Yes</p> <p>$\log K_p$ (skin permeation) -7,01 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) + 0,656</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,956</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,56</p> <p>skinSen (sensibilização da pele) --- 0,38</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,423 -log mol/kg (1423,468 mg/kg) > 500 mg/kg</p>




<p>1a)</p> <p>CSB00046</p>  <p>5-Chloro-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_9H_7ClN_4$</p> <p>CAS#: 63099-91-9 Ponderal: 194,62</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2,69</p> <p>TPSA 113,02</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 397,83</p> <p>ão 9</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>volume 327,91</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,07</p> <p>Modulador de canal iônico -0,19</p> <p>Inibidor de quinase 0,54</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,86</p> <p>Inibidor de protease -0,18</p> <p>Inibidor de enzima 0,01</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -6,33 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,724</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,908</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) + 0,53</p> <p>SimSen (sensibilização da pele) --- 0,278</p> <p>SD0 (LD50 de toxicidade aguda) 2,544 -log mol/kg (1136,824 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>2)</p> <p>DS000574</p>  <p>2-[2-(2-Pyridinyl)ethyl]aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{12}H_{11}N_2$</p> <p>Peso molecular: 198,26</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,84</p> <p>TPSA 95,19</p> <p>atoms 30</p> <p>MW 401,47</p> <p>ão 7</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 7</p> <p>volume 366,77</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,27</p> <p>Modulador de canal iônico -0,02</p> <p>Inibidor de quinase 0,74</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,49</p> <p>Inibidor de protease -0,04</p> <p>Inibidor de enzima 0,36</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,77 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) +++ 0,938</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,954</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) + 0,546</p> <p>SimSen (sensibilização da pele) --- 0,22</p> <p>SD0 (LD50 de toxicidade aguda) 2,526 -log mol/kg (1146,796 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>3a)</p> <p>VEP00066</p>  <p>2-Chloro-4-(3-fluorobenzoyloxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{15}H_{11}FO_2$</p> <p>Peso molecular: 251,60</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,84</p> <p>TPSA 95,19</p> <p>atoms 30</p> <p>MW 401,47</p> <p>ão 7</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 7</p> <p>volume 366,77</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,27</p> <p>Modulador de canal iônico -0,02</p> <p>Inibidor de quinase 0,74</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,49</p> <p>Inibidor de protease -0,04</p> <p>Inibidor de enzima 0,36</p>	<p>GI absorption High</p> <p>BB permeant No</p> <p>P-gp substrate No</p> <p>CYP1A2 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C19 inhibitor Yes</p> <p>CYP2C9 inhibitor Yes</p> <p>CYP2D6 inhibitor Yes</p> <p>CYP3A4 inhibitor Yes</p> <p>og K_p (skin permeation) -5,52 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,719</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,904</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) - 0,398</p> <p>SimSen (sensibilização da pele) --- 0,369</p> <p>SD0 (LD50 de toxicidade aguda) 2,540 -log mol/kg (1268,536 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>4)</p> <p>DS004833</p>  <p>3-(4-methylpiperazin-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_{12}H_{17}N_2$</p> <p>Peso molecular: 191,27</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,05</p> <p>TPSA 88,78</p> <p>atoms 29</p> <p>MW 394,48</p> <p>ão 8</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 5</p> <p>volume 364,41</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,22</p> <p>Modulador de canal iônico -0,11</p> <p>Inibidor de quinase 0,70</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,73</p> <p>Inibidor de protease -0,13</p> <p>Inibidor de enzima 0,19</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -6,61 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,836</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,834</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) - 0,446</p> <p>SimSen (sensibilização da pele) --- 0,295</p> <p>SD0 (LD50 de toxicidade aguda) 2,559 -log mol/kg (1092,5 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>5)</p> <p>CBR01277</p>  <p>3-(pyrrolidin-1-yl)methyl)aniline dihydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Molecular): $C_9H_{12}N_2$</p> <p>Peso molecular: 209,32</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,26</p> <p>TPSA 85,54</p> <p>atoms 28</p> <p>MW 379,46</p> <p>ão 7</p> <p>nOH/NH 3</p> <p>violações 0</p> <p>rotb 6</p> <p>volume 351,87</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,23</p> <p>Modulador de canal iônico -0,12</p> <p>Inibidor de quinase 0,67</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,66</p> <p>Inibidor de protease 0,01</p> <p>Inibidor de enzima 0,25</p>	<p>absorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -6,25 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,894</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,916</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) - 0,486</p> <p>SimSen (sensibilização da pele) --- 0,273</p> <p>SD0 (LD50 de toxicidade aguda) 2,545 -log mol/kg (1092,859 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

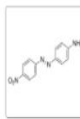
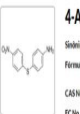
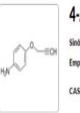
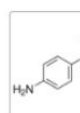
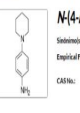
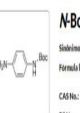
<p>6) CD51/12373</p>  <p>3-chloro-4-(3-fluorobenzoyloxy)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{17}H_{13}F_2O_2$ Peso molecular: 251,68</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 5,48 TPSA 91,54</p> <p>atoms 32 MW 454,89 não 7 nOHNH 3 nviolations 1 nrotb 7 volume 381,58</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,09</p> <p>Modulador de canal iônico -0,19 Inibidor de quinase 0,59 Ligante de receptor nuclear -0,48 Inibidor de protease -0,17 Inibidor de enzima 0,15</p>	<p>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) -5,38 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,886</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,89</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,456</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,147</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,506 -log mol/kg (148,748 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>7) CD50/4347</p>  <p>4-(1,2,3-thiadiazol-4-yl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_7H_6N_4S$ Peso molecular: 177,23</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,34 TPSA 108,09</p> <p>atoms 27 PM 380,43 não 8 nOHNH 3 nviolations 0 nrotb 5 volume 319,72</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,21</p> <p>Modulador de canal iônico -0,47 Inibidor de quinase 0,87 Ligante de receptor nuclear -0,50 Inibidor de protease -0,07 Inibidor de enzima 0,47</p>	<p>absorption Low BB permeant No P-gp substrate No YP1A2 inhibitor Yes YP2C19 inhibitor No YP2C9 inhibitor Yes YP2D6 inhibitor Yes YP3A4 inhibitor Yes log K_p (skin permeation) -6,36 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,74</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,938</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,58</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,214</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,354 -log mol/kg (1062,375 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>8) EP01/15</p>  <p>3-(4-Methyl-1H-imidazol-1-yl)-5-(trifluoromethyl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{17}H_{12}F_3N_2$ CAS: 4837101 Peso molecular: 322,1</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 4,09 TPSA 100,13</p> <p>atoms 33 MW 458,44 não 8 nOHNH 3 nviolations 0 nrotb 7 volume 383,19</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,31</p> <p>Modulador de canal iônico 0,00 Inibidor de quinase 0,69 Ligante de receptor nuclear -0,50 Inibidor de protease 0,01 Inibidor de enzima 0,40</p>	<p>absorção GI Baixo 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) -5,88 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,8</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,858</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,418</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,109</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,788 -log mol/kg (800,362 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>9) BR01/115</p>  <p>4-(1H-pyrazol-1-yl)aniline hydrochloride Empirical Formula (Molecular Weight): $C_8H_8N_2$ Peso molecular: 155,65</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 2,60 TPSA 100,13</p> <p>atoms 27 MW 362,39 não 8 nOHNH 3 nviolations 0 nrotb 5 volume 318,53</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,20</p> <p>Modulador de canal iônico -0,10 Inibidor de quinase 0,80 Ligante de receptor nuclear -0,89 Inibidor de protease -0,12 Inibidor de enzima 0,35</p>	<p>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) -6,55 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,742</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,884</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,664</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,383</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,479 -log mol/kg (1205,518 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>10) TMT00020</p>  <p>3-(1,3-Dioxan-2-yl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{12}H_{16}O_2$ Peso molecular: 178,22</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 3,10 TPSA 100,77</p> <p>atoms 28 PM 382,42 não 8 nOHNH 3 nviolations 0 nrotb 5 volume 340,27</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR -0,06</p> <p>Modulador de canal iônico -0,20 Inibidor de quinase 0,52 Ligante de receptor nuclear -0,73 Inibidor de protease -0,15 Inibidor de enzima 0,29</p>	<p>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) -6,66 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,804</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,914</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,396</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,208</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,439 -log mol/kg (1201,684 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>11) BR71/07</p>  <p>4-(2,4-DI-TERT-PENTYLOXY)ANILINE Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{21}H_{28}O_2$ CAS: 113202-87-9 Peso molecular: 324,48</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration v2021.10</p> <p>miLogP 8,60 TPSA 91,54</p> <p>atoms 39 PM 528,70 não 7 nOHNH 3 nviolations 2 nrotb 10 volume 512,28</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante de</p> <p>GPCR 0,19</p> <p>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</p>	<p>absorção GI Baixo permeante BBB Não Substrato P-gp sim inibidor de CYP1A2 Não inibidor de CYP2C19 sim inibidor de CYP2C9 Não inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 Não log K_p (permeação da pele) -3,16 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,808</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,714</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,328</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,352</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 3,193 -log mol/kg (128,008 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

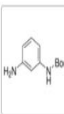
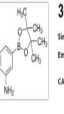
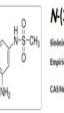
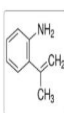
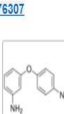
<p>2) BR02023</p>  <p>2-Fluoro-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): C₇H₅N₄F Peso molecular: 127,14</p>	<p>Motor de propriedade Molinspirat</p> <p>miLogP 2.04 TPSA 125.91</p> <p>natoms 28 MW 382,36 não 10 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 315,15</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v.</p> <p>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</p>	<p>absorção GI Alto 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 K_p (permeação da pele) -6,92 c</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) + 0,604</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,872</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,59</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,208</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.485 -log mol/kg (1281,077 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>63) CBR02080</p>  <p>3-(2-Methyl-2H-tetrazol-5-yl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): C₈H₇N₄ Peso molecular: 190,20</p>	<p>Motor de propriedade Molinspirati</p> <p>miLogP 2.55 TPSA 125.91</p> <p>natoms 28 MW 378,40 não 10 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 326,78</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.4</p> <p>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</p>	<p>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) -6,57 cm</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) + 0,634</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,848</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,568</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,187</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.502 -log mol/kg (1251,097 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>4) DS004111</p>  <p>4-(2-methyl-1,3-thiazol-4-yl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): C₉H₉N₂S CAS No.: 25221-49-2 Peso molecular: 190,26</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>miLogP 3.40 TPSA 95.19</p> <p>natoms 28 PM 393,47 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 340,44</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.4</p> <p>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</p>	<p>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) -6,57</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,842</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,904</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,592</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,192</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,51 -log mol/kg (1255,548 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>5) 500898</p>  <p>5-CHLORO-2-(P-TOLYLOXY)ANILINE Formula linear: C₁₂H₁₁ClO CAS No.: 18824-48-9 Peso molecular: 220,7</p>	<p>Motor de propriedade Molinspir</p> <p>miLogP 5,89 TPSA 91,54</p> <p>natoms 31 MW 436,90 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 6 volume 376,40</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.6</p> <p>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</p>	<p>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) -5,04 cm</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,88</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,918</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,454</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,159</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,838 -log mol/kg (1419,415 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>6) DS017202</p>  <p>3-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): C₉H₉N₂ Peso molecular: 173,21</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiratio</p> <p>miLogP 2.69 TPSA 100.13</p> <p>natoms 28 PM 376,42 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 335,09</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2</p> <p>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</p>	<p>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) -6,35 cm</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,804</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,918</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,648</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,174</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,829 -log mol/kg (1413,455 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>67) CS0319843</p>  <p>3-Chloro-4-(3,5-dimethyl-1-piperidinyl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): C₁₇H₂₃ClN Peso molecular: 278,76</p>	<p>Motor de propriedade Molinspirat:</p> <p>miLogP 5.41 TPSA 85.54</p> <p>natoms 31 MW 441,96 não 7 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 5 volume 398,57</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2</p> <p>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</p>	<p>absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não inibidor de CYP1A2 Não inibidor de CYP2C19 Não inibidor de CYP2C9 sim inibidor de CYP2D6 sim inibidor de CYP3A4 Não log K_p (permeação da pele) -5,11 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores HERG) ++ 0,814</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,87</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,39</p> <p>SkinSen (sensibilização da pele) --- 0,27</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,745 -log mol/kg (802,391 mg/kg) > 500 mg/kg</p>


<p>68)</p> <p>PMH16248</p>  <p>4-((E)-2-(2-Pyridinylethyl)phenyl)aniline dihydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{17}H_{16}N_2$</p> <p>Peenmolekular: 20117</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>miLogP 4.29</p> <p>TPSA 95.19</p> <p>natoms 30</p> <p>MW 399,45</p> <p>não 7</p> <p>nOHNH 3</p> <p>nviolações 0</p> <p>nrotb 6</p> <p>volume 360,58</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>GPCR 0,24</p> <p>Modulador de canal iônico -0,04</p> <p>Inibidor de quinase 0,75</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,53</p> <p>Inibidor de protease -0,05</p> <p>Inibidor de enzima 0,33</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,72 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores ERG) +++ 0,944</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,934</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) ++ 0,754</p> <p>Skatzen (sensibilização da pele) --- 0,209</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.537 -log mol/kg (1192,52 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>69)</p> <p>CDS006665</p>  <p>4-(4'-aminomethylphenyl)phenyl-1-N-Boc-aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{21}H_{21}N_2O_2$</p> <p>Peenmolekular: 29333</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>miLogP 3.30</p> <p>TPSA 115.98</p> <p>natoms 35</p> <p>MW 472,57</p> <p>não 8</p> <p>nOHNH 5</p> <p>nviolações 0</p> <p>nrotb 7</p> <p>volume 435,87</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>GPCR 0,08</p> <p>Modulador de canal iônico -0,25</p> <p>Inibidor de quinase 0,38</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,56</p> <p>Inibidor de protease -0,01</p> <p>Inibidor de enzima 0,22</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp Não</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 Não</p> <p>inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>inibidor de CYP3A4 Não</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,48 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores ERG) ** 0,818</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ** 0,772</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) --- 0,286</p> <p>Skatzen (sensibilização da pele) --- 0,358</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 1.779 -log mol/kg (787,889 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>70)</p> <p>ZK071</p>  <p>2-(2-(4-tert-octylphenoxy)ethoxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{24}H_{30}O_2$</p> <p>CAS No.: 154034-04 Peenmolekular: 54148</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>miLogP 7.67</p> <p>TPSA 100.77</p> <p>natoms 39</p> <p>PM 530,67</p> <p>nON 8</p> <p>nOHNH 3</p> <p>nviolações 2</p> <p>nrotb 11</p> <p>volume 504.71</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>GPCR 0,10</p> <p>Modulador de canal iônico -0,27</p> <p>Inibidor de quinase 0,38</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,37</p> <p>Inibidor de protease -0,10</p> <p>Inibidor de enzima 0,12</p>	<p>bsorção GI Baixo</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>inibidor de CYP1A2 Não</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 Não</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 Não</p> <p>og K_p (permeação da pele) -4,20 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores ERG) +++ 0,93</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ** 0,842</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) --- 0,286</p> <p>Skatzen (sensibilização da pele) --- 0,17</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 3.079 -log mol/kg (442,409 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>71)</p> <p>MT00306</p>  <p>4-(2-(Pyridin-4-yl)ethyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{12}H_{11}N$</p> <p>CAS No.: 6318-70-3 Peenmolekular: 19030</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>miLogP 3.77</p> <p>TPSA 95.19</p> <p>natoms 30</p> <p>MW 401,47</p> <p>não 7</p> <p>nOHNH 3</p> <p>nviolações 0</p> <p>nrotb 7</p> <p>volume 366,77</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>GPCR 0,20</p> <p>Modulador de canal iônico -0,06</p> <p>Inibidor de quinase 0,69</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,55</p> <p>Inibidor de protease -0,04</p> <p>Inibidor de enzima 0,31</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,80 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores ERG) +++ 0,952</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,908</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,634</p> <p>Skatzen (sensibilização da pele) --- 0,21</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.802 -log mol/kg (1003,814 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>72)</p> <p>DSM15579</p>  <p>4-(4-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{11}H_{10}N_4$</p> <p>Peenmolekular: 17420</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>miLogP 2.72</p> <p>TPSA 113.02</p> <p>natoms 28</p> <p>MW 377,41</p> <p>não 9</p> <p>nOHNH 3</p> <p>nviolações 0</p> <p>nrotb 5</p> <p>volume 330,94</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>GPCR 0,03</p> <p>Modulador de canal iônico -0,36</p> <p>Inibidor de quinase 0,45</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,78</p> <p>Inibidor de protease -0,38</p> <p>Inibidor de enzima 0,17</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 Não</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 Não</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -7,05 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores ERG) + 0,882</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ** 0,894</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,604</p> <p>Skatzen (sensibilização da pele) --- 0,164</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 1.950 -log mol/kg (1390,724 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>73)</p> <p>TM70006</p>  <p>4-(2-(Pyridin-4-yl)ethyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{12}H_{11}N$</p> <p>CAS No.: 6318-70-3 Peenmolekular: 19030</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>miLogP 3.77</p> <p>TPSA 95.19</p> <p>natoms 30</p> <p>MW 401,47</p> <p>não 7</p> <p>nOHNH 3</p> <p>nviolações 0</p> <p>nrotb 7</p> <p>volume 366,77</p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>GPCR 0,20</p> <p>Modulador de canal iônico -0,06</p> <p>Inibidor de quinase 0,69</p> <p>Ligante de receptor nuclear -0,55</p> <p>Inibidor de protease -0,04</p> <p>Inibidor de enzima 0,31</p>	<p>bsorção GI Alto</p> <p>ermeante BBB Não</p> <p>Substrato P-gp sim</p> <p>inibidor de CYP1A2 sim</p> <p>inibidor de CYP2C19 sim</p> <p>inibidor de CYP2C9 sim</p> <p>inibidor de CYP2D6 sim</p> <p>inibidor de CYP3A4 sim</p> <p>og K_p (permeação da pele) -5,80 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores ERG) +++ 0,952</p> <p>H-HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,908</p> <p>AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,634</p> <p>Skatzen (sensibilização da pele) --- 0,21</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.802 -log mol/kg (1003,814 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

<p>74)</p> <p>PHM19167</p>  <p>[E]-4-[2-Pyridin-2-yl]vinylaniline hydrochloride</p> <p>Formula: $C_{12}H_{10}N_2$</p> <p>Resumo:</p> <p>miLogP 4,29 TPSA 95,19 natoms 30 MW 399,45 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 360,58</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v.</p> <p>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</p>	<p>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) -5,72 cm²</p>	<p>ERG (bloqueadores ERG) *** 0,944 H-HT (Hepatotoxicidade Humana) *** 0,904 AMES (Mutagenicidade de Ames) ** 0,754 Skatens (sensibilização da pele) --- 0,309 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,826 -log mol/kg (119,232 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>75)</p> <p>CDS000862</p>  <p>4-[4-(4-fluorophenyl)-1,3-thiazol-2-yl]aniline</p> <p>Epical:Formula: $C_{14}H_{10}FN_2S$</p> <p>Resumo:</p> <p>miLogP 5,46 TPSA 106,19 natoms 33 MW 459,51 não 7 nOHNH 4 nviolações 1 nrotb 5 volume 382,69</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v.</p> <p>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</p>	<p>absorção GI Baixo permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 sim Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 Não Log K_p (permeação da pele) -5,45 cm²</p>	<p>ERG (bloqueadores ERG) ** 0,86 H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ** 0,852 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,498 Skatens (sensibilização da pele) --- 0,244 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,801 -log mol/kg (1449,744 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>76)</p> <p>SB0000510</p>  <p>4-[2-(pyrrolidin-1-yl)ethyl]aniline hydrochloride</p> <p>Epical:Formula: $C_{14}H_{18}N_2$</p> <p>Resumo:</p> <p>miLogP 3,38 TPSA 96,53 natoms 28 PM 379,46 não 7 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 6 volume 351,14</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v.</p> <p>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</p>	<p>absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -6,15 cm²</p>	<p>ERG (bloqueadores ERG) ** 0,897 H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ** 0,85 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,498 Skatens (sensibilização da pele) - 0,333 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,54 -log mol/kg (869,302 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>77)</p> <p>TV000453</p>  <p>3-(6-methylimidazo[1,2-a]pyridin-2-yl)aniline</p> <p>Epical:Formula: $C_{14}H_{12}N_4$</p> <p>Resumo:</p> <p>miLogP 4,21 TPSA 110,60 natoms 31 MW 412,45 não 8 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 4 volume 361,56</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v.</p> <p>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</p>	<p>absorção GI Baixo permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -6,15 cm²</p>	<p>ERG (bloqueadores ERG) ** 0,778 H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ** 0,84 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,624 Skatens (sensibilização da pele) --- 0,205 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,873 -log mol/kg (102,49 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>78)</p> <p>H010467</p>  <p>5-chloro-2-(1H-pyrrol-1-yl)aniline</p> <p>Formula: $C_9H_8ClN_2$</p> <p>Resumo:</p> <p>miLogP 3,88 TPSA 96,53 natoms 27 MW 385,86 não 7 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 4 volume 331,07</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v.</p> <p>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</p>	<p>absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp Não Inibidor de CYP1A2 sim Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 Não Inibidor de CYP2D6 sim Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -5,87 cm²</p>	<p>ERG (bloqueadores ERG) ** 0,773 H-HT (Hepatotoxicidade Humana) *** 0,964 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,424 Skatens (sensibilização da pele) - 0,314 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,877 -log mol/kg (102,49 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>79)</p> <p>TV000453</p>  <p>3-(6-methylimidazo[1,2-a]pyridin-2-yl)aniline</p> <p>Epical:Formula: $C_{14}H_{12}N_4$</p> <p>Resumo:</p> <p>miLogP 0,49 TPSA 110,10 natoms 31 PM 415,48 não 8 nOHNH 5 nviolações 0 nrotb 4 volume 370,88</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v.</p> <p>GPCR 0,21 Modulador de canal iônico -0,01 Inibidor de quinase 0,53 Ligante de receptor nuclear -0,48 Inibidor de protease -0,20 Inibidor de enzima 0,28</p>	<p>absorção GI Baixo permeante BBB Não Substrato P-gp sim Inibidor de CYP1A2 Não Inibidor de CYP2C19 Não Inibidor de CYP2C9 sim Inibidor de CYP2D6 Não Inibidor de CYP3A4 sim Log K_p (permeação da pele) -7,09 cm²</p>	<p>ERG (bloqueadores ERG) + 0,648 H-HT (Hepatotoxicidade Humana) ** 0,728 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,388 Skatens (sensibilização da pele) - 0,345 LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,66 -log mol/kg (998,965 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

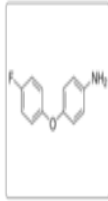
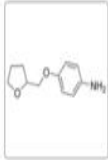
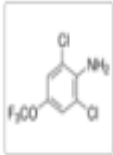
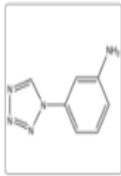
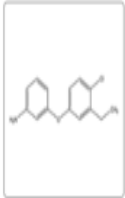
<p>80)</p> <p>Q7V00082</p>  <p>4-Bromo-2-(2-(pyrrolidin-1-yl)ethoxy)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{14}H_{18}BrNO$ Ponderal: 285.53</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspira</p> <p><u>miLogP</u> 4,00 <u>TPSA</u> 105,77</p> <p>atoms 30 MW 474,36 não 8 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 7 <u>volume</u> 378,01</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</u></p> <p>GPCR 0,18 Modulador de canal iônico -0,25 Inibidor de quinase 0,63 Ligante de receptor nuclear -0,60 Inibidor de protease -0,17 Inibidor de enzima 0,16</p>	<p>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) -6,45 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ** 0,772</p> <p>hHT (Hepatotoxicidade Humana) *** 0,948 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,378 SkinSens (sensibilização da pele) --- 0,274</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,007 -log mol/kg (1476,073 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>81)</p> <p>CBR00697</p>  <p>4-[5-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl(methyl)aniline dihydrochloride Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{11}H_{12}N_4$ Ponderal: 203.5</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspira</p> <p><u>miLogP</u> 0,63 <u>TPSA</u> 134,87</p> <p>atoms 21 PM 287,28 não 9 nOHNH 5 nviolações 0 nrotb 3 <u>volume</u> 241,62</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</u></p> <p>GPCR -0,03 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</p>	<p>absorção GI Alto permeante BBB Não Substrato P-gp sim 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) -7,35 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) --- 0,255</p> <p>hHT (Hepatotoxicidade Humana) *** 0,628 AMES (Mutagenicidade de Ames) + 0,584 SkinSens (sensibilização da pele) --- 0,388</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,903 -log mol/kg (902,015 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>82)</p> <p>TMD0114</p>  <p>4-Chloro-3-(5,7-dimethylbenzo[d]oxazol-2-yl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{20}H_{17}ClNO$ Ponderal: 323,71</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspira</p> <p><u>miLogP</u> 4,52 <u>TPSA</u> 145,35</p> <p>atoms 33 MW 462,90 não 9 nOHNH 6 nviolações 1 nrotb 4 <u>volume</u> 382,58</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</u></p> <p>Ligante de GPCR -0,10 Modulador de canal iônico -0,3 Inibidor de quinase 0,40 Ligante de receptor nuclear -0,44 Inibidor de protease -0,42 Inibidor de enzima 0,18</p>	<p>absorção GI Baixo 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 K_p (permeação da pele) -5,93 cm/s</p>	<p>hERG (bloqueadores hERG) + 0,62</p> <p>hHT (Hepatotoxicidade Humana) + 0,686 AMES (Mutagenicidade de Ames) - 0,366 SkinSens (sensibilização da pele) --- 0,373</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,674 -log mol/kg (980,383 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>83)</p> <p>MT01139</p>  <p>2,6-Dibromo-4-(6-methylbenzo[d]thiazol-2-yl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{17}H_{12}Br_2N_2S$ Ponderal: 392,11</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspira</p> <p><u>miLogP</u> 7,33 <u>TPSA</u> 95,19</p> <p>atoms 34 MW 601,32 não 7 nOHNH 3 nviolações 2 nrotb 5 <u>volume</u> 420,20</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</u></p> <p>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</p>	<p>GI absorption Low BBB permeant No P-gp substrate No CYP1A2 inhibitor No CYP2C19 inhibitor No CYP2C9 inhibitor No CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor No log K_p (skin permeation) -5,08 cm/s</p>	<p>ERG (ERG Blockers) ** 0,847</p> <p>hHT (Human Hepatotoxicity) + 0,674 AMES (Ames Mutagenicity) - 0,45 SkinSens (skin sensitization) --- 0,202</p> <p>LD50 (LD50 of acute toxicity) 3,006 -log mol/kg (893,074 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>84)</p> <p>191658</p>  <p>4-Aminobenzyl alcohol Sinônimo(s): 4-Hydroxymethylaniline Formula linear: $H_2NCH_2CH_2OH$ CAS No.: 623-04-1 EC No.: 210-767-5 Peso molecular: 107,09 Definição No.:</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspi</p> <p><u>miLogP</u> 2,42 <u>TPSA</u> 102,53</p> <p>atoms 24 MW 326,36 não 7 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 5 <u>volume</u> 290,73</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</u></p> <p>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</p>	<p>GI absorption High BBB permeant No P-gp substrate Yes CYP1A2 inhibitor Yes CYP2C19 inhibitor No CYP2C9 inhibitor No CYP2D6 inhibitor Yes CYP3A4 inhibitor Yes log K_p (skin permeation) -6,79 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) + 0,604</p> <p>hHT (Hepatotoxicidade Humana) *** 0,96 AMES (Ames Mutagenicity) + 0,578 SkinSens (sensibilização da pele) --- 0,356</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,443 -log mol/kg (1179,483 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>85)</p> <p>863204</p>  <p>2-Morpholinoaniline Sinônimo(s): 2-(4-Morpholinyl)aniline Empirical Formula (Molecular Weight): $C_{10}H_{12}N_2O$ CAS No.: 5585-33-1 Peso molecular: 176,20 Definição No.:</p>	<p><u>Motor de propriedade</u> Molinspi</p> <p><u>miLogP</u> 2,98 <u>TPSA</u> 94,77</p> <p>atoms 28 PM 381,44 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 <u>volume</u> 344,05</p>	<p><u>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</u></p> <p>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</p>	<p>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) -6,67 cm/s</p>	<p>ERG (ERG Blockers) ** 0,79</p> <p>hHT (Human Hepatotoxicity) *** 0,938 AMES (Ames Mutagenicity) - 0,414 SkinSens (sensibilização da pele) --- 0,245</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,593 -log mol/kg (1024,574 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

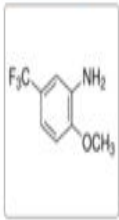
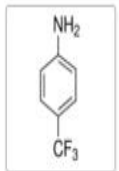
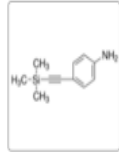
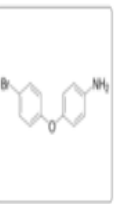
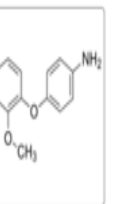
<p>86) 364797</p>  <p>Disperse Orange 3</p> <p>Sinônimo(s): 4-(4-Hidroxifenil)azulina Fórmula linear: $C_{12}H_{10}N_2O_2$</p> <p>CAS No.: 730-40-5 EC No.: 211-984-8</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2021.03 Ligante d</p> <p>miLogP 5.23 TPSA 152.85</p> <p>atoms 33 PM 445,44 não 11 nOHNH 3 nviolações 2 nrotb 7 volume 379,76</p>	<p>GPCR -0,03 Modulador de canal iônico -0,16 Ligante de receptor nuclear -0,84 Inibidor de protease -0,22 Inibidor de enzima 0,12</p>	<p>Biorção GI permeante BBB Substrato P-gp Inibidor de CYP1A2 Inibidor de CYP2C9 Inibidor de CYP2C19 Inibidor de CYP2D6 Inibidor de CYP3A4 log K_p (permeação da pele)</p> <p>Baixo Não Não sim sim sim Não sim</p> <p>-5,74 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores HERG) ++ 0,736</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) ++ 0,754</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) +++ 0,018</p> <p>KinDen (sensibilização da pele) - 0,398</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2.538 -log mol/kg (1290,59 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>87) 467188</p>  <p>4-Amino-4'-nitrodiphenyl sulfide</p> <p>Sinônimo(s): 4-(4-Nitrofenil)disulfânio Fórmula linear: $C_{14}H_{11}N_2OS_2$</p> <p>CAS No.: 101-59-7 EC No.: 202-957-1</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 5.00 TPSA 128.13</p> <p>atoms 32 PM 449,49 não 9 nOHNH 3 nviolações 1 nrotb 7 volume 378,79</p>	<p>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</p>	<p>GI absorption BBB permeant P-gp substrate CYP1A2 inhibitor CYP2C9 inhibitor CYP2C19 inhibitor CYP2D6 inhibitor CYP3A4 inhibitor log K_p (skin permeation)</p> <p>Low No No Yes Yes Yes No Yes</p> <p>-5,56 cm</p>	<p>ERG (ERG Blockers) ++ 0,736</p> <p>HT (Human Hepatotoxicity) +++ 0,936</p> <p>MES (Ames Mutagenicity) ++ 0,838</p> <p>KinDen (skin sensitization) - 0,409</p> <p>LD50 (LD50 of acute toxicity) 2.488 -log mol/kg (1244,241 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>88) 73784</p>  <p>4-Aminophenyl propargyl ether</p> <p>Sinônimo(s): 4-(prop-2-inoil)anilina Fórmula linear: $C_{10}H_9NO$</p> <p>CAS No.: 26557-70-8 EC No.: 265-571-1</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 3.29 TPSA 91.54</p> <p>atoms 26 PM 376,38 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 6 volume 313,96</p>	<p>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 0,27</p>	<p>Biorção GI permeante BBB Substrato P-gp Inibidor de CYP1A2 Inibidor de CYP2C9 Inibidor de CYP2D6 Inibidor de CYP3A4 log K_p (permeação da pele)</p> <p>Alto Não Não sim Não sim sim</p> <p>-6,24 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores HERG) ++ 0,774</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,934</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) + 0,818</p> <p>KinDen (skin sensitization) --- 0,353</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,473 -log mol/kg (1236,502 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>89) 251917</p>  <p>Sulfanilic Acid</p> <p>Sinônimo(s): Anilina-4-sulfônico Fórmula linear: $C_6H_7NO_2S$</p> <p>CAS No.: EC No.:</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 0,07 TPSA 136,67</p> <p>atoms 26 PM 376,39 não 9 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 5 volume 305,36</p>	<p>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</p>	<p>GI absorption BBB permeant P-gp substrate CYP1A2 inhibitor CYP2C9 inhibitor CYP2C19 inhibitor CYP2D6 inhibitor CYP3A4 inhibitor log K_p (skin permeation)</p> <p>Low No Yes Yes No No No</p> <p>-7,35 cm</p>	<p>ERG (ERG Blockers) - 0,410</p> <p>HT (Human Hepatotoxicity) ++ 0,836</p> <p>MES (Ames Mutagenicity) - 0,316</p> <p>KinDen (skin sensitization) --- 0,256</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,812 -log mol/kg (2661,362 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>90) 66620</p>  <p>N-(4-Aminophenyl)piperidine</p> <p>Sinônimo(s): 4-(4-Aminofenil)pirrolidina Fórmula linear: $C_{11}H_{15}N$</p> <p>CAS No.: 209-60-6 EC No.: 209-60-6</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 4.09 TPSA 85.54</p> <p>atoms 28 PM 379,46 não 7 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 351.87</p>	<p>GPCR 0,19 Modulador de canal iônico -0,13 Inibidor de quinase 0,64 Ligante de receptor nuclear -0,62 Inibidor de protease -0,09 Inibidor de enzima 0,23</p>	<p>Biorção GI permeante BBB Substrato P-gp Inibidor de CYP1A2 Inibidor de CYP2C9 Inibidor de CYP2C19 Inibidor de CYP2D6 Inibidor de CYP3A4 log K_p (permeação da pele)</p> <p>Alto Não Não sim sim sim sim</p> <p>-5,79 cm</p>	<p>ERG (Bloqueadores HERG) ++ 0,878</p> <p>HT (Hepatotoxicidade Humana) +++ 0,918</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) + 0,53</p> <p>KinDen (sensibilização da pele) --- 0,279</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,59 -log mol/kg (1981,912 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>91) 8485</p>  <p>N-Boc-p-phenylenediamine</p> <p>Sinônimo(s): 4-(4-aminofenil)carbonato de t-butiloxocarbonyl Fórmula linear: $C_{17}H_{21}NO_3$</p> <p>CAS No.: 71021-64-9 EC No.: 275-112-7</p>	<p>Motor de propriedade Molinspira</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 4.05 TPSA 112.80</p> <p>atoms 30 PM 413,48 não 9 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 9 volume 379,27</p>	<p>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</p>	<p>GI absorption BBB permeant P-gp substrate CYP1A2 inhibitor CYP2C9 inhibitor CYP2C19 inhibitor CYP2D6 inhibitor CYP3A4 inhibitor log K_p (skin permeation)</p> <p>High No No No Yes Yes No</p> <p>-6,00 cm</p>	<p>ERG (ERG Blockers) ++ 0,742</p> <p>HT (Human Hepatotoxicity) +++ 0,978</p> <p>MES (Ames Mutagenicity) --- 0,282</p> <p>KinDen (skin sensitization) --- 0,386</p> <p>LD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,545 -log mol/kg (1178,833 mg/kg) > 500 mg/kg</p>



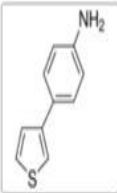
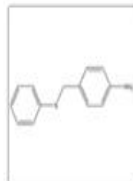
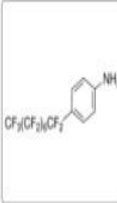
<p>22) 63175</p> <p>N-Boc-m-phenylenediamir</p>  <p>Sinônimo(s): tert-Butyl-3-aminophenylcarbamate, 3-((tert-butoxycarbonylamino)phenyl)amine Empirical Formula (Hill Notation): C₁₅H₁₇N₂O₂ CAS No.: 68421-88-5 Peso mol: 263,33</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 4,03 TPSA 112,80</p> <p>atoms 30 PM 413,48 não 9 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 9 volume 379,27</p>	<p>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</p>	<p>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 Não Inibidor de CYP3A4 sim log K_p (permeação da pele) -6,00 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,732</p> <p>hERG (Human Hepatotoxicity) +++ 0,984</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) --- 0,292</p> <p>Kinases (sensibilização da pele) --- 0,186</p> <p>DD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,992 -log mol/kg (1293,985 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>23) 74886</p> <p>3-Aminophenylboronic acid pinacol ester</p>  <p>Sinônimo(s): 3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₂H₁₅BO₂ CAS No.: 210907-84-9 Peso molecular: 215,09</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration v2</p> <p>miLogP 2,85 TPSA 137,79</p> <p>atoms 31 PM 423,28 não 9 nOHNH 6 nviolações 1 nrotb 4 volume 404,09</p>	<p>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</p> <p>Obter dados como texto (para copiar/colar).</p>	<p>absorção GI Alto 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 K_p (permeação da pele) -6,76 cm/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) + 0,518</p> <p>hERG (Human Hepatotoxicity) + 0,664</p> <p>MES (Ames Mutagenicity) - 0,316</p> <p>Kinases (skin sensitization) --- 0,208</p> <p>DD50 (LD50 of acute toxicity) 3,124 -log mol/kg (318,148 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>24) 55300</p> <p>1-(2-Aminophenyl)-1H-pyrazole</p>  <p>Sinônimo(s): 2-(1H-Pyrazol-5-yl)aniline, 1-(2-Aminophenyl)pyrazole Empirical Formula (Hill Notation): C₈H₈N₂ CAS No.: 54705-91-8 Peso molecular: 140,15</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 2,97 TPSA 100,13</p> <p>atoms 27 PM 362,39 não 8 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 318,53</p>	<p>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</p>	<p>GI absorption High BB 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) -6,39 cm/s</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,796</p> <p>hERG (Human Hepatotoxicity) +++ 0,912</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) + 0,604</p> <p>Kinases (sensibilização da pele) --- 0,369</p> <p>DD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,491 -log mol/kg (1169,984 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>25) 83278</p> <p>N-(3-Aminophenyl)methanesulfonamide</p>  <p>Sinônimo(s): 3-(Aminofenil)metanosulfonamida, N-(3-aminofenil)metanosulfonamida, N-(3-aminofenil)metanosulfonamida Empirical Formula (Hill Notation): C₇H₉N₃O₂ CAS No.: 3746-73-1 Peso molecular: 186,22</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 2,29 TPSA 128,47</p> <p>atoms 27 PM 389,44 não 9 nOHNH 4 nviolações 0 nrotb 6 volume 326,31</p>	<p>GPCR 0,17 Modulador de canal iônico -0,08 Inibidor de quinase 0,65 Ligante de receptor nuclear -0,64 Inibidor de protease -0,00 Inibidor de enzima 0,26</p>	<p>GI absorption Low BB 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) -7,27 cm/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) + 0,508</p> <p>hERG (Human Hepatotoxicity) +++ 0,962</p> <p>MES (Ames Mutagenicity) - 0,484</p> <p>Kinases (skin sensitization) --- 0,174</p> <p>DD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,349 -log mol/kg (1743,561 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>26) 84212</p> <p>2-Isopropenylaniline</p>  <p>Fórmula linear: H₂C=C(CH₃)C₆H₄NH₂ CAS No.: 52542-19-3 Peso molecular: 145,17 EC No.: 258-008-7</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 3,76 TPSA 82,30</p> <p>atoms 25 PM 336,39 não 6 nOHNH 3 nviolações 0 nrotb 5 volume 310,21</p>	<p>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</p>	<p>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) -5,22</p>	<p>ERG (bloqueadores hERG) ++ 0,802</p> <p>hERG (Human Hepatotoxicity) +++ 0,97</p> <p>MES (Mutagenicidade de Ames) + 0,994</p> <p>Kinases (sensibilização da pele) --- 0,214</p> <p>DD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,537 -log mol/kg (976,899 mg/kg) > 500 mg/kg</p>
<p>27) 76307</p> <p>3,4'-Oxydianiline</p>  <p>Fórmula linear: OC₆H₄(OH)C₆H₄NH₂ CAS No.: 2657-87-6 EC No.: 220-190-0</p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p>miLogP 3,88 TPSA 117,56</p> <p>atoms 30 PM 403,44 não 8 nOHNH 5 nviolações 0 nrotb 6 volume 357,60</p>	<p>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</p>	<p>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) -6,02 cm/s</p>	<p>ERG (hERG Blockers) ++ 0,742</p> <p>hERG (Human Hepatotoxicity) + 0,638</p> <p>MES (Ames Mutagenicity) + 0,678</p> <p>Kinases (skin sensitization) --- 0,168</p> <p>DD50 (LD50 de toxicidade aguda) 2,906 -log mol/kg (1261,192 mg/kg) > 500 mg/kg</p>

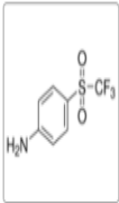
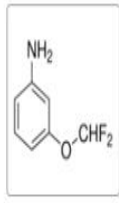
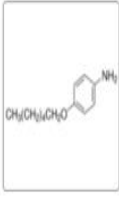
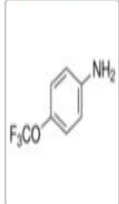
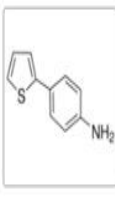
<p>18223</p> <p>N,N-Dimethyl-1,3-phenylenediamine dihydrochloride</p>  <p> <small> Síntese: 1,3-Dimethyl-phenylenediamine dihydrochloride, 3-Dimethyl-phenylenediamine dihydrochloride Fórmula: $C_{12}H_{16}N_2H_2Cl_2$ CAS No.: 3575-32-4 Provedor: 209.12 Molécula: 354304 </small> </p>	<p>Motor de propriedade Molinspiration</p> <p> miLogP 3.16 TPSA 85.54 atoms 25 PM 339,40 rotb 7 OH 3 violações 0 rotb 5 volume 311,82 </p>	<p>Pontuação de bioatividade de Molinspiration</p> <p> 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 </p>	<p> 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) -6,15 cm/s </p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>ERG (bloqueadores hERG)</td> <td>++</td> <td>0,75</td> <td></td> </tr> <tr> <td>HT (Hepatotoxicidade Humana)</td> <td>++</td> <td>0,874</td> <td></td> </tr> <tr> <td>MES (Mutagenicidade de Ames)</td> <td>+</td> <td>0,606</td> <td></td> </tr> <tr> <td>skinem (sensibilização da pele)</td> <td>---</td> <td>0,39</td> <td></td> </tr> <tr> <td>LD50 (LD50 de toxicidade aguda)</td> <td>2,49-3mg/mg/kg (1098,274 mg/kg)</td> <td></td> <td>> 800 mg/kg</td> </tr> </tbody> </table>	ERG (bloqueadores hERG)	++	0,75		HT (Hepatotoxicidade Humana)	++	0,874		MES (Mutagenicidade de Ames)	+	0,606		skinem (sensibilização da pele)	---	0,39		LD50 (LD50 de toxicidade aguda)	2,49-3mg/mg/kg (1098,274 mg/kg)		> 800 mg/kg
ERG (bloqueadores hERG)	++	0,75																						
HT (Hepatotoxicidade Humana)	++	0,874																						
MES (Mutagenicidade de Ames)	+	0,606																						
skinem (sensibilização da pele)	---	0,39																						
LD50 (LD50 de toxicidade aguda)	2,49-3mg/mg/kg (1098,274 mg/kg)		> 800 mg/kg																					

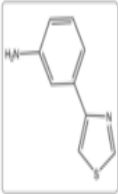
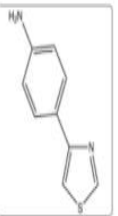

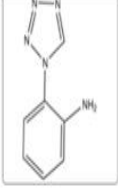
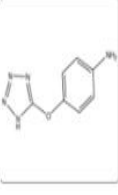
Anexo B - Capacidade de atravessar barreira hemato-encefálica.

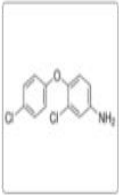
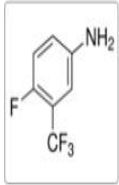
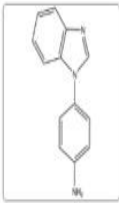
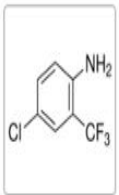
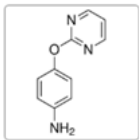
<p>1) Produto nº 695408</p>  <p>4-(4-Fluorophenoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₂H₁₂FNO CAS No.: 36160-82-4 Peso molecular: 203,21</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,70%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,149 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,889</td> <td>• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,70%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,149 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,889	• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.	• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,70%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,149 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,889	• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.	• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792												
<p>2) CBR01220</p>  <p>4-(Tetrahydrofuran-2-ylmethoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₁H₁₃O₂ CAS No.: 91246-63-8 Peso molecular: 193,24</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,64%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,065 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,836</td> <td>• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,64%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,065 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,836	• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.	• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,64%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,065 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,836	• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.	• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792												
<p>3) 429899</p>  <p>2,6-Dichloro-4-(trifluoromethoxy)aniline Fórmula linear: C₇H₄Cl₂OCF₃NH₂ CAS No.: 99479-66-0 Peso molecular: 246,01</p>	<p>Não foi possível calcular</p>															
<p>4) CBR01855</p>  <p>3-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₇H₇N₅ CAS No.: 14213-12-8 Peso molecular: 161,16</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,009%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,255 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,646</td> <td>• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,009%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,255 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,646	• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.	• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,009%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,255 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,646	• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.	• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792												
<p>5) PH016744</p>  <p>3-(4-Chloro-3-ethylphenoxy)aniline Fórmula linear: C₁₄H₁₄O₂N₁Cl₁ CAS No.: 263266-18-8</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>88,124%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,396 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,862</td> <td>• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,124%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,396 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,862	• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.	• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,124%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8, pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,396 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro: ISBN 978763832287, pp. 174 • Livro: ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,862	• Razão BB >0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10. PM < 400-500. Sem ácidos.	• J NEUROCHEM. 70, 1761-1792												

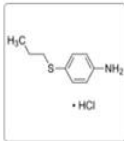
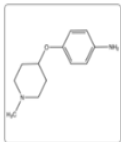
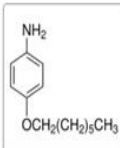
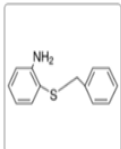
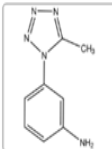
<p>5) 336599</p>  <p>2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Sinônimo(s): 6-Methoxy-α,α,α-trifluoro-m-toluidine</p> <p>Fórmula linear: <chem>CH3OC6H3(CF3)NH2</chem></p> <p>CAS No.: 349-65-5 Peso molecular: 191.15</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>81,52%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,807 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico</td> <td>• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,706</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J NEUROCHEM 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	81,52%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,807 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico	• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,706	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J NEUROCHEM 70, 1761-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	81,52%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,807 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico	• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,706	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J NEUROCHEM 70, 1761-1792												
<p>6) 224936</p>  <p>4-(Trifluoromethyl)aniline</p> <p>Sinônimo(s): 4-Aminobenzotrifluoride, α,α,α-Trifluoro-ρ-toluidine</p> <p>Fórmula linear: <chem>CF3C6H4NH2</chem></p> <p>CAS No.: 455-14-1 Peso molecular: 161.12</p> <p>EC No.: 207-236-5 Beilstein No.: 1564853</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,388%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,79 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico</td> <td>• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,853</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J NEUROCHEM 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,388%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,79 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico	• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,853	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J NEUROCHEM 70, 1761-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,388%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,79 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico	• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,853	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J NEUROCHEM 70, 1761-1792												
<p>7) 686360</p>  <p>4-((Trimethylsilyl)ethynyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C11H15NSi</chem></p> <p>CAS No.: 75867-39-9 Peso molecular: 189.33</p> <p>Comparar Nº do produto Descrição</p>	<p>Não foi possível calcular</p>															
<p>8) 695394</p>  <p>4-(4-Bromophenoxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C12H10BrNO</chem></p> <p>CAS No.: 31465-35-7 Peso molecular: 264.12</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,33%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,433 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico</td> <td>• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,706</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J NEUROCHEM 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,33%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,433 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico	• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,706	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J NEUROCHEM 70, 1761-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,33%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,433 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico	• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,706	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J NEUROCHEM 70, 1761-1792												
<p>9) CBR01173</p>  <p>4-(2-Methoxyphenoxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C13H13NO2</chem></p> <p>CAS No.: 13066-01-8 Peso molecular: 215.25</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>82,75%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,072 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico</td> <td>• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,78</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J NEUROCHEM 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	82,75%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,072 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico	• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,78	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J NEUROCHEM 70, 1761-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	82,75%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,072 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico	• Livro ISBN 9787962832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pag 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,78	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J NEUROCHEM 70, 1761-1792												

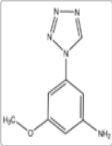
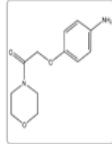
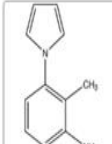
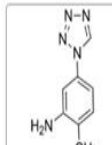
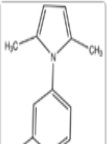
<p>10) 695386</p>  <p>4-(4-Chlorophenoxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{10}ClNO$</p> <p>CAS No.: 101-79-1 Peso molecular: 219.67</p> <p>EC No.: 202-976-5</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,74%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,398 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,825</td> <td>• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,74%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,398 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,825	• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,74%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,398 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,825	• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792												
<p>11) 193135</p>  <p>3,5-Bis(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Sinônimo(s): 5-Amino-0,0,0,0',0',0'-hexafluoro-m-xylene, 0,0,0,0',0',0'-Hexafluoro-3,5-xilidina</p> <p>Fórmula linear: $(CF_3)_2C_7H_5NH_2$</p> <p>CAS No.: 328-74-5 Peso molecular: 229.12</p> <p>EC No.: 206-335-0 Bellstein No.: 654318</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>82,29%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,863 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+++</td> <td>0,907</td> <td>• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	82,29%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,863 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+++	0,907	• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	82,29%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,863 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+++	0,907	• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792												
<p>12) 650080</p>  <p>4-(Thiophen-3-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_7NS$</p> <p>CAS No.: 834884-74-1 Peso molecular: 175.25</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>92,77%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,116 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,601</td> <td>• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	92,77%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,116 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,601	• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	92,77%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,116 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,601	• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792												
<p>14) KOB0081</p>  <p>4-[(Phenylsulfanyl)methyl]aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{13}NS$</p> <p>CAS No.: 13738-70-0 Peso molecular: 215.31</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>94,504%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,444 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,781</td> <td>• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,504%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,444 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,781	• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,504%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,444 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 97876382287, pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8, pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,781	• Razão BB >=1; BBB+; Razão BB <1; BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1701-1792												
<p>15) 28623</p>  <p>4-(Heptadecafluorooctyl)aniline</p> <p>Sinônimo(s): 4-(Perfluorooctyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{14}H_9F_{17}N$</p> <p>CAS No.: 83766-52-3 Peso molecular: 511.18</p>	<p style="text-align: center;">Não foi possível calcular</p>															

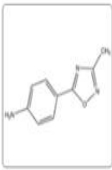
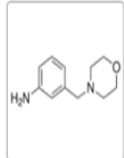
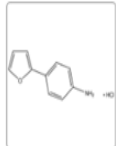
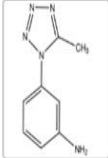
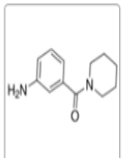
<p>16) 481920</p>  <p>4-(Trifluoromethylsulfonyl)aniline</p> <p>Fórmula linear: $CF_3SO_2C_6H_4NH_2$</p> <p>CAS No.: 473-27-8 Peso molecular: 225.19</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,00%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-1,668 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,707</td> <td>• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,00%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	-1,668 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,707	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,00%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	-1,668 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,707	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792												
<p>17) 566446</p>  <p>3-(Difluoromethoxy)aniline</p> <p>Fórmula linear: $CHF_2OC_6H_4NH_2$</p> <p>CAS No.: 22236-08-4 Peso molecular: 159.13</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>82,239%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,728 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,784</td> <td>• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	82,239%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,728 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,784	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	82,239%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,728 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,784	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792												
<p>18) 222100</p>  <p>4-(Hexyloxy)aniline</p> <p>Fórmula linear: $CH_3(CH_2)_5OC_6H_4NH_2$</p> <p>CAS No.: 39905-57-2 Peso molecular: 193.29</p> <p>EC No.: 254-696-8</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,369%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,082 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,892</td> <td>• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,369%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	0,082 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,892	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,369%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	0,082 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,892	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792												
<p>19) 337056</p>  <p>4-(Trifluoromethoxy)aniline</p> <p>Sinônimo(s): <i>o,o,o</i>-Trifluoro-<i>p</i>-anisidine</p> <p>Fórmula linear: $CF_3OC_6H_4NH_2$</p> <p>CAS No.: 461-82-5 Peso molecular: 177.12</p> <p>EC No.: 207-317-5 Beilstein No.: 2090209</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>81,334%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,842 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,877</td> <td>• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	81,334%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,842 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,877	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	81,334%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,842 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,877	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792												
<p>20) 654558</p>  <p>4-(Thiophen-2-yl)aniline</p> <p>Sinônimo(s): 4-(2-Thienyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_9NS$</p> <p>CAS No.: 70010-48-9 Peso molecular: 175.25</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>91,776%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,116 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,601</td> <td>• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB</td> <td>• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	91,776%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	-0,116 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,601	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	91,776%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	-0,116 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 9787562832287 pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,601	• Razão BB >0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB	• J. MEUROCHEM. 70, 1701-1792												

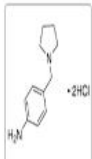
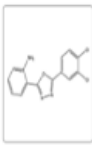
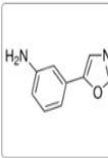
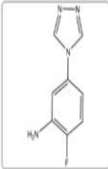
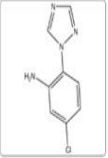
<p>21) CBR00146</p>  <p>3-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_2S$</p> <p>CAS No.: 134812-28-5 Peso molecular: 176.24</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>88,70%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,05 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,05</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,70%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,05 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,05	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,70%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,05 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,05	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702												
<p>22) CBR00254</p>  <p>4-(1,3-Thiazol-4-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_2S$</p> <p>CAS No.: 60759-10-6 Peso molecular: 176.24</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>88,70%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,05 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,05</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,70%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,05 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,05	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,70%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,05 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,05	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702												
<p>23) CBR00351</p>  <p>4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}N_3$</p> <p>CAS No.: 52708-36-8 Peso molecular: 209.25</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>90,42%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,03 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,749</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,42%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,03 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,749	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,42%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,03 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,749	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702												
<p>24) CBR00378</p>  <p>2-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_7H_7N_4$</p> <p>CAS No.: 14210-51-6 Peso molecular: 161.16</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>81,504%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,26 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,673</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	81,504%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,26 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,673	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	81,504%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,26 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,673	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702												
<p>25) CBR00260</p>  <p>4-(1H-Tetrazol-5-yloxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_7H_7N_4O$</p> <p>CAS No.: 467226-44-4 Peso molecular: 177.16</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>81,442%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,456 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>-</td> <td>0,461</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos</td> <td>• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	81,442%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,456 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	-	0,461	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	81,442%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8, pag. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,456 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico. 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente. >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN: 978756282287, pp. 174 • Livro ISBN: 978-0-1236-9520-8, pag. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	-	0,461	• Razão BB >=0,1 BBB+ Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB. Ligações de H (total) < 0-10. PM < 400-500. Sem ácidos	• J NEUROCHEM. 70, 1703-1702												

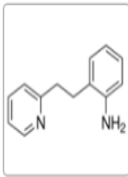
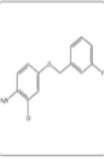
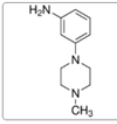
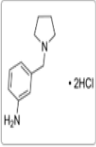
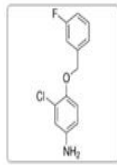
<p>26) 561274</p>  <p>3-Chloro-4-(4-chlorophenoxy)aniline</p> <p>Fórmula linear: $C_{12}H_9NH_2ClOCl$</p> <p>CAS No.: 24900-79-6 Peso molecular: 254.11</p> <p>EC No.: 246-519-8</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,347%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,612 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,035</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,347%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,612 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,035	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,347%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,612 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,035	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792												
<p>27) 217778</p>  <p>4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Sinónimos(s): 5-Amino-2-fluorobenzotrifluoride, o.o.o.4-Tetrafluoro-m-toluidine</p> <p>Fórmula linear: $FC_6H_3(CF_3)NH_2$</p> <p>CAS No.: 2357-47-3 Peso molecular: 179.11</p> <p>EC No.: 219-095-7</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>84,323%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,8 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,044</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	84,323%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,8 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,044	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	84,323%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,8 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,044	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792												
<p>28) CBR00351</p>  <p>4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{11}N_3$</p> <p>CAS No.: 52708-36-8 Peso molecular: 209.25</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>90,429%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,01 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,749</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,429%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,01 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,749	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,429%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,01 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,749	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792												
<p>30) 217727</p>  <p>4-Chloro-2-(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Sinónimos(s): 4-Chloro-o.o.o.-trifluoro-o-toluidine, 2-Amino-5-chlorobenzotrifluoride</p> <p>Fórmula linear: $ClC_6H_3(CF_3)NH_2$</p> <p>CAS No.: 445-03-4 Peso molecular: 195.57</p> <p>EC No.: 207-151-3</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>84,448%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,838 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> <td>• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,83</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	84,448%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Distribuição de Volume)	<0,838 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,83	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	84,448%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Distribuição de Volume)	<0,838 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo 0,04-20L/kg; • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue; Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,83	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792												
<p>31)</p> <p>CDS006360</p>  <p>4-(2-Pyrimidinyl)oxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_9N_3O$</p> <p>Peso molecular: 187.20</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>84.644 %</td> <td>90%</td> <td>• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.</td> <td>• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194</td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td><0,242 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Optimal: 0,04-20L/kg; • Range: <0,07L/kg Confinado to blood; Bound to plasma protein or highly hydrophobic; 0,07-0,7L/kg Evenly distributed; >0,7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.</td> <td>• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229</td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>+</td> <td>0,641</td> <td>• BB ratio >=0,1 BBB+; BB ratio <0,1 BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.</td> <td>• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	84.644 %	90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194	VD (Volume Distribution)	<0,242 L/kg	0,04-20 L/kg	• Optimal: 0,04-20L/kg; • Range: <0,07L/kg Confinado to blood; Bound to plasma protein or highly hydrophobic; 0,07-0,7L/kg Evenly distributed; >0,7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229	BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0,641	• BB ratio >=0,1 BBB+; BB ratio <0,1 BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792
FPB (Plasma Protein Binding)	84.644 %	90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.	• ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 194												
VD (Volume Distribution)	<0,242 L/kg	0,04-20 L/kg	• Optimal: 0,04-20L/kg; • Range: <0,07L/kg Confinado to blood; Bound to plasma protein or highly hydrophobic; 0,07-0,7L/kg Evenly distributed; >0,7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.	• Livro ISBN 978762832287 pp. 174 • Livro ISBN 978-0-1236-9520-8 pág. 229												
BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0,641	• BB ratio >=0,1 BBB+; BB ratio <0,1 BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.	• J.NEUROCHEM. 70, 1761-1792												

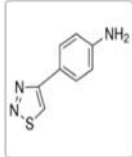
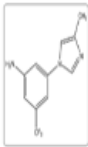
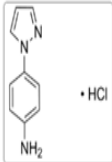
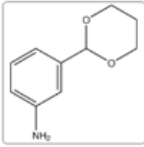
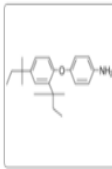
<p>32)</p> <p>CBR01435</p>  <p>4-(Propylthio)aniline hydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_{14}ClNS$</p> <p>Peso molecular: 203,73</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,232%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,037 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,817</td> <td>• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,232%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	VD (Distribuição de Volume)	<0,037 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,817	• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,232%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.										
VD (Distribuição de Volume)	<0,037 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,817	• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.										
<p>β3)</p> <p>CBR00034</p>  <p>4-[(1-Methylpiperidin-4-yl)oxy]aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{19}N_2O$</p> <p>CAS No.: 358789-72-7 Peso molecular: 206,28</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>84,631 %</td> <td>90%</td> <td>• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.</td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>0,517 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Optimal: 0,04-20L/kg • Range: <0,07L/kg: Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg: Evenly distributed; >0,7L/kg: Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>++</td> <td>0,829</td> <td>• BB ratio >=0,1: BBB+; BB ratio <0,1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Plasma Protein Binding)	84,631 %	90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.	VD (Volume Distribution)	0,517 L/kg	0,04-20 L/kg	• Optimal: 0,04-20L/kg • Range: <0,07L/kg: Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg: Evenly distributed; >0,7L/kg: Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.	BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0,829	• BB ratio >=0,1: BBB+; BB ratio <0,1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
PPB (Plasma Protein Binding)	84,631 %	90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.										
VD (Volume Distribution)	0,517 L/kg	0,04-20 L/kg	• Optimal: 0,04-20L/kg • Range: <0,07L/kg: Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg: Evenly distributed; >0,7L/kg: Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.										
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0,829	• BB ratio >=0,1: BBB+; BB ratio <0,1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.										
<p>34)</p> <p>T340006</p>  <p>4-(HEPTYLOXY)ANILINE</p> <p>Fórmula linear: $C_{13}H_{21}NO$</p> <p>CAS No.: 39905-44-7 Peso molecular: 207,31</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,144%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,191 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+++</td> <td>0,901</td> <td>• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,144%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	VD (Distribuição de Volume)	0,191 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+++	0,901	• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,144%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.										
VD (Distribuição de Volume)	0,191 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+++	0,901	• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.										
<p>35)</p> <p>S704121</p>  <p>2-(BENZYLTHIO)ANILINE</p> <p>Fórmula linear: $C_{13}H_{13}NS$</p> <p>CAS No.: 6325-92-4 Peso molecular: 215,319</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>95,173 %</td> <td>90%</td> <td>• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.</td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td><0,121 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Optimal: 0,04-20L/kg • Range: <0,07L/kg: Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg: Evenly distributed; >0,7L/kg: Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>+</td> <td>0,648</td> <td>• BB ratio >=0,1: BBB+; BB ratio <0,1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Plasma Protein Binding)	95,173 %	90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.	VD (Volume Distribution)	<0,121 L/kg	0,04-20 L/kg	• Optimal: 0,04-20L/kg • Range: <0,07L/kg: Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg: Evenly distributed; >0,7L/kg: Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.	BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0,648	• BB ratio >=0,1: BBB+; BB ratio <0,1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
PPB (Plasma Protein Binding)	95,173 %	90%	• Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index.										
VD (Volume Distribution)	<0,121 L/kg	0,04-20 L/kg	• Optimal: 0,04-20L/kg • Range: <0,07L/kg: Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg: Evenly distributed; >0,7L/kg: Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic.										
BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0,648	• BB ratio >=0,1: BBB+; BB ratio <0,1: BBB- • These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.										
<p>36)</p> <p>CBR00266</p>  <p>3-(5-Methyl-1H-tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_5$</p> <p>CAS No.: 500701-24-6 Peso molecular: 175,19</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,941%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,165 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,744</td> <td>• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,941%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	VD (Distribuição de Volume)	<0,165 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,744	• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,941%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.										
VD (Distribuição de Volume)	<0,165 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg: Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg: Distribuído uniformemente; >0,7L/kg: Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico.										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,744	• Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.										

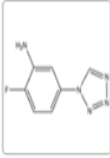
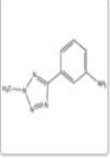
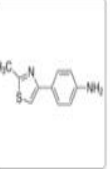
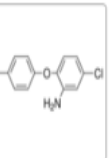
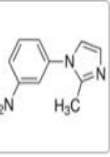
<p>37)</p> <p>CBR00344</p>  <p>3-Methoxy-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_5O$</p> <p>CAS No.: 883291-48-3 Peso molecular: 191.19</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>83.308 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0.27 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>++</td> <td>0.728</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	83.308 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0.27 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.728	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	83.308 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0.27 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.728	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>38)</p> <p>CBR00087</p>  <p>4-(2-Morpholin-4-yl-2-oxoethoxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{16}N_2O_3$</p> <p>CAS No.: 76870-09-2 Peso molecular: 236.27</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,825%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0.211 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,781</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,825%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0.211 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,781	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,825%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0.211 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,781	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>39)</p> <p>CBR00524</p>  <p>2-Methyl-3-(1H-pyrrol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{12}N_2$</p> <p>CAS No.: 137352-75-1 Peso molecular: 172.23</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>88.276 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>0.142 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>+</td> <td>0.69</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	88.276 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	0.142 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0.69	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	88.276 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	0.142 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0.69	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>40)</p> <p>CBR01393</p>  <p>2-Methyl-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_5$</p> <p>CAS No.: 384860-18-8 Peso molecular: 175.19</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,605%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0.159 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,511</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,605%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0.159 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,511	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,605%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0.159 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,511	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>41)</p> <p>CBR00198</p>  <p>3-(2,5-Dimethyl-1H-pyrrol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{14}N_2$</p> <p>CAS No.: 247225-33-8 Peso molecular: 186.25</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>89.294 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>0.234 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>++</td> <td>0.723</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	89.294 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	0.234 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.723	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	89.294 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	0.234 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g. protein, lipid),highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.723	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										

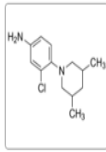
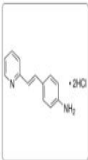
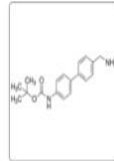
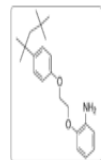
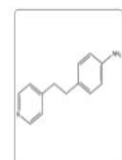
<p>42)</p> <p>CBR00158</p>  <p>4-(3-Methyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_3O$</p> <p>CAS No.: 76635-31-9 Peso molecular: 175.19</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,045%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,09 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,695</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,045%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,09 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,695	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,045%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,09 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,695	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos. 										
<p>43)</p> <p>CDS007538</p>  <p>3-(morpholin-4-ylmethyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}N_2O$</p> <p>Peso molecular: 192.26</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>87,873 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>0,298 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg; Range: <0,07L/kg. Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>+++</td> <td>0,934</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10, MW < 400-500, No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	87,873 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	0,298 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg; Range: <0,07L/kg. Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	+++	0,934	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10, MW < 400-500, No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	87,873 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	0,298 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg; Range: <0,07L/kg. Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	+++	0,934	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10, MW < 400-500, No acids. 										
<p>44)</p> <p>CBR00754</p>  <p>4-(2-Furyl)aniline hydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{10}ClNO$</p> <p>Peso molecular: 195.65</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,487%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,064 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,785</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,487%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,064 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,785	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,487%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,064 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,785	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos. 										
<p>45)</p> <p>CBR00266</p>  <p>3-(5-Methyl-1H-tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_5$</p> <p>CAS No.: 500701-24-6 Peso molecular: 175.19</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>87,541 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0,165 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg; Range: <0,07L/kg. Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>++</td> <td>0,744</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10, MW < 400-500, No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	87,541 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0,165 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg; Range: <0,07L/kg. Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0,744	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10, MW < 400-500, No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	87,541 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0,165 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg; Range: <0,07L/kg. Confinado to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0,744	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10, MW < 400-500, No acids. 										
<p>46)</p> <p>PH010713</p>  <p>3-(1-piperidinylcarbonyl)aniline</p> <p>Fórmula linear: $C_{12}H_{16}N_2O$</p> <p>Peso molecular: 204.274</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,629%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,125 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,82</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,629%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,125 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,82	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,629%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	0,125 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,82	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10, PM < 400-500, Sem ácidos. 										

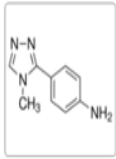
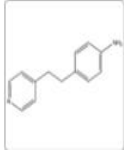
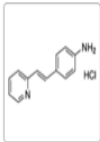
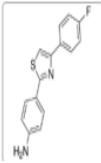
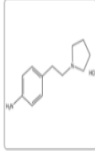
<p>47)</p> <p>CBR00965</p>  <p>4-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{15}Cl_2N_2$</p> <p>Peso molecular: 249.18</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>90.069 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>0.573 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>+++</td> <td>0.934</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	90.069 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	0.573 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	+++	0.934	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	90.069 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	0.573 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	+++	0.934	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>48)</p> <p>PH016685</p>  <p>2-[5-(3,4-Dichlorophenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl]aniline</p> <p>Formula linear: $C_{18}H_{10}Cl_2N_2O_2$</p> <p>CAS No.: 175135-30-5</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>93,52%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,6 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,655</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	93,52%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,6 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,655	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	93,52%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,6 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,655	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>49)</p> <p>CDS014206</p>  <p>3-(1,3-oxazol-5-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_8N_2O$</p> <p>CAS No.: 157837-31-5 Peso molecular: 160.17</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>85,045 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0.134 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>++</td> <td>0.727</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	85,045 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0.134 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.727	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	85,045 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0.134 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.727	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>50)</p> <p>CBR00066</p>  <p>2-Fluoro-5-(4H-1,2,4-triazol-4-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_7FN_4$</p> <p>CAS No.: 1082766-13-9 Peso molecular: 178.17</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,2%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,365 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,71</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,2%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,365 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,71	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,2%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,365 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,71	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>51)</p> <p>CBR00446</p>  <p>5-Chloro-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_7ClN_4$</p> <p>CAS No.: 450399-92-5 Peso molecular: 194.62</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,658%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,492 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,719</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,658%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,492 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,719	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,658%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,492 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Alcance: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,719	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										

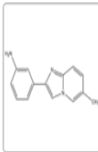
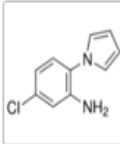
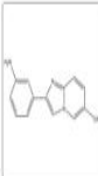
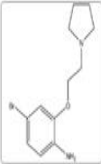
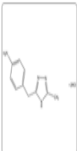
<p>52)</p> <p>CDS00574</p>  <p>2-[2-(2-Pyridinyl)ethyl]aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{14}N_2$</p> <p>Peso molecular: 198.26</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>94,806%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,094 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,945</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,806%	90%	• 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: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,945	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,806%	90%	• 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: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,945	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.										
<p>53)</p> <p>VBP00085</p>  <p>2-Chloro-4-(3-fluorobenzyloxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}ClFNO$</p> <p>Peso molecular: 251.68</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>93,653%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,706 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,511</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	93,653%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	VD (Distribuição de Volume)	<0,706 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,511	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	93,653%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.										
VD (Distribuição de Volume)	<0,706 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,511	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.										
<p>54)</p> <p>CDS004833</p>  <p>3-(4-methylpiperazin-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{17}N_2$</p> <p>Peso molecular: 191.27</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,392%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,45 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,769</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,392%	90%	• 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: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,769	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,392%	90%	• 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: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,769	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.										
<p>55)</p> <p>CBR01277</p>  <p>3-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{15}Cl_2N_2$</p> <p>Peso molecular: 249.18</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>89,892%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,568 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+++</td> <td>0,929</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	89,892%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	VD (Distribuição de Volume)	0,568 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+++	0,929	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	89,892%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.										
VD (Distribuição de Volume)	0,568 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+++	0,929	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.										
<p>56)</p> <p>CDS012378</p>  <p>3-chloro-4-(3-fluorobenzyloxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{11}ClFNO$</p> <p>Peso molecular: 251.68</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>90,009%</td> <td>90%</td> <td>• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.</td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td><0,654 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td>• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.</td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,876</td> <td>• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.</td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,009%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.	VD (Distribuição de Volume)	<0,654 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,876	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,009%	90%	• Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico.										
VD (Distribuição de Volume)	<0,654 L/kg	0,04-20 L/kg	• Ótimo: 0,04-20L/kg • Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico.										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,876	• Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- • Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.										

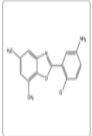
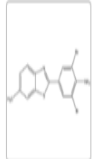
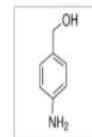
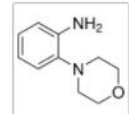
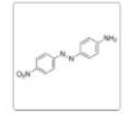
<p>57)</p> <p>CDS014347</p>  <p>4-(1,2,3-thiadiazol-4-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_8H_7N_3S$</p> <p>Peso molecular: 177.23</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>89,852%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,284 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,258</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	89,852%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,284 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,258	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	89,852%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,284 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,258	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>58)</p> <p>VBP00135</p>  <p>3-(4-Methyl-1H-imidazol-1-yl)-5-(trifluoromethyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{12}F_3N_2$</p> <p>CAS No.: 641571-11-1 Peso molecular: 241.21</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>88,652%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,465 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,55</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,652%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,465 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,55	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,652%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,465 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,55	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>59)</p> <p>CBR01115</p>  <p>4-(1H-pyrazol-1-yl)aniline hydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_7H_{10}ClN_3$</p> <p>Peso molecular: 195.65</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,769%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,067 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,519</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,769%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,067 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,519	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,769%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,067 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Alcance: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,519	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>60</p> <p>TMT00020</p>  <p>3-(1,3-Dioxan-2-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{13}NO_2$</p> <p>Peso molecular: 179.22</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,7%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,133 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,702</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,7%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,133 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,702	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,7%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,133 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,702	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>61)</p> <p>S987107</p>  <p>4-(2,4-DI-TERT-PENTYLOXY)ANILINE</p> <p>Fórmula linear: $C_{22}H_{31}NO$</p> <p>CAS No.: 112322-87-9 Peso molecular: 325.498</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,196%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,098 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,677</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,196%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,098 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,677	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,196%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	0,098 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,677	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										

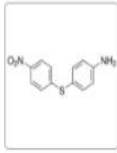
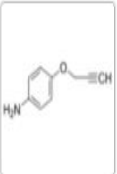
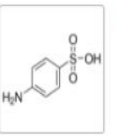
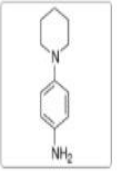
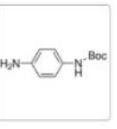
<p>62)</p> <p>CBR02023</p>  <p>2-Fluoro-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_7FNO_2$</p> <p>Peso molecular: 127.14</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,689%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,374 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,583</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,689%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,374 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,583		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,689%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,374 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,583		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>63)</p> <p>CBR02060</p>  <p>3-(2-Methyl-2H-tetrazol-5-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{10}N_4$</p> <p>Peso molecular: 190.28</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>87,816%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,2 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,66</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,816%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,2 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,66		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	87,816%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,2 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,66		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>64)</p> <p>CDS004111</p>  <p>4-(2-methyl-1,3-thiazol-4-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{10}N_2S$</p> <p>CAS No.: 25021-49-2</p> <p>Peso molecular: 190.26</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>90,195%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,125 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,192</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,195%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,125 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,192		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,195%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,125 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,192		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>65)</p> <p>S508098</p>  <p>5-CHLORO-2-(P-TOLYLOXY)-ANILINE</p> <p>Fórmula linear: $C_{13}H_{12}ClNO$</p> <p>CAS No.: 16824-48-9</p> <p>Peso molecular: 233.7</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,656%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,499 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,647</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,656%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,499 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,647		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,656%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,499 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,647		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>66)</p> <p>CDS017202</p>  <p>3-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{11}N_3$</p> <p>Peso molecular: 173.21</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,43%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,064 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,534</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,43%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,064 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,534		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,43%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,064 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,534		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1 BBB+; Razão BB <0,1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												

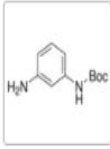
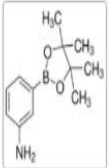
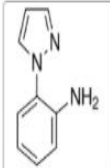
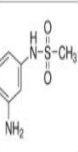
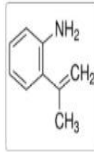
<p>67)</p> <p>CDS019943</p>  <p>3-Chloro-4-(3,5-dimethyl-1-piperidinyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{19}ClN_2$</p> <p>Peso molecular: 238,76</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>83,059%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,214 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,89</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	83,059%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,214 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,89		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	83,059%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,214 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,89		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>68)</p> <p>PH016248</p>  <p>4-[(E)-2-(2-pyridinyl)ethenyl]aniline dihydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{14}Cl_2N_2$</p> <p>Peso molecular: 269,17</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>94,638%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,001 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,628</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,638%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,001 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,628		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,638%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,001 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,628		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>69)</p> <p>CDS005503</p>  <p>4-(4'-aminomethyl)phenyl-1-N-Boc-aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{18}H_{22}N_2O_2$</p> <p>Peso molecular: 298,38</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>90,403%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,092 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,528</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,403%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,092 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,528		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,403%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,092 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,528		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>70)</p> <p>S629073</p>  <p>2-(2-(4-tert-octylphenoxy)ethoxy)aniline</p> <p>Fórmula linear: $C_{22}H_{31}NO_2$</p> <p>CAS No.: 114203-82-6 Peso molecular: 341,498</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>84,79%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,082 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,769</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	84,79%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,082 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,769		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	84,79%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,082 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,769		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>71)</p> <p>TMT00306</p>  <p>4-(2-(pyridin-4-yl)ethyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{14}N_2$</p> <p>CAS No.: 6318-70-3 Peso molecular: 198,26</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>94,387%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,105 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,532</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,387%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,105 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,532		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,387%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,105 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,532		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												

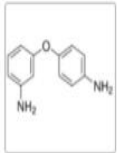
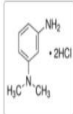
<p>72)</p> <p>CDS015579</p>  <p>4-(4-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_{10}N_4$</p> <p>Peso molecular: 174.20</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,327%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,089 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,83</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,327%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,089 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,83		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,327%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,089 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,83		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>73)</p> <p>TMT00306</p>  <p>4-(2-(pyridin-4-yl)ethyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{14}N_2$</p> <p>CAS No.: 6318-70-3 Peso molecular: 198.26</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>94,387%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,105 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,532</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,387%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,105 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,532		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,387%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,105 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,532		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>74)</p> <p>PH019167</p>  <p>(E)-4-(2-(pyridin-2-yl)vinyl)aniline hydrochloride</p> <p>Fórmula linear: $C_{13}H_{13}N_2Cl$</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>94,638%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,001 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,628</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,638%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,001 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,628		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	94,638%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,001 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,628		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>75)]</p> <p>CDS008062</p>  <p>4-[4-(4-fluorophenyl)-1,3-thiazol-2-yl]aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{15}H_{11}FN_2S$</p> <p>Peso molecular: 270.32</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>92,877%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,463 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,116</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	92,877%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,463 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,116		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	92,877%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,463 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,116		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>76)</p> <p>BBO000510</p>  <p>4-(2-(pyrrolidin-1-yl)ethyl)aniline hydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{19}N_2 \cdot HCl$</p> <p>Peso molecular: 226.75</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>90,602%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,587 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,628</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,602%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,587 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,628		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,602%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,587 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variabilidade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico: 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente: >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,628		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1; BBB+; Razão BB <0,1; BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												

<p>77)</p> <p>OTV000493</p>  <p>3-(6-Methylimidazo[1,2-a]pyridin-2-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{14}H_{13}N_3$</p> <p>Peso molecular: 223.27</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>91,863%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,038 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,05</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	91,863%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,038 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,05		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	91,863%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,038 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,05		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>78)</p> <p>PH010467</p>  <p>5-chloro-2-(1H-pyrrol-1-yl)aniline</p> <p>Fórmula linear: $C_{10}H_9ClN_2$</p> <p>Peso molecular: 192.65</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>82,63%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,022 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,65</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	82,63%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,022 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,65		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	82,63%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,022 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,65		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>79)</p> <p>OTV000493</p>  <p>3-(6-Methylimidazo[1,2-a]pyridin-2-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{14}H_{13}N_3$</p> <p>Peso molecular: 223.27</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>90,169%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,021 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,128</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,169%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,021 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,128		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	90,169%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	0,021 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,128		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>80)</p> <p>OTV000862</p>  <p>4-Bromo-2-(2-(pyrrolidin-1-yl)ethoxy)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{17}BrN_2O$</p> <p>Peso molecular: 285.18</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,36%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,154 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,661</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,36%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,154 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,661		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,36%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,154 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,661		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												
<p>81)</p> <p>CBR00697</p>  <p>4-[(5-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)methyl]aniline dihydrochloride</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{14}Cl_2N_4$</p> <p>Peso molecular: 261.15</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>47,731%</td> <td></td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,326 L/kg</td> <td></td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>-</td> <td>0,345</td> <td></td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	47,731%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,326 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	-	0,345		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	47,731%		90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 												
VD (Distribuição de Volume)	-0,326 L/kg		0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 												
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	-	0,345		<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 												

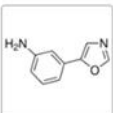


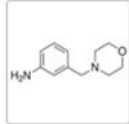
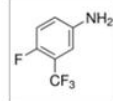
<p>82)</p> <p>TMT00114</p>  <p>4-Chloro-3-(5,7-dimethylbenzo[d]oxazol-2-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{19}H_{17}ClN_2O$</p> <p>Peso molecular: 272.73</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,047%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,53 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,187</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,047%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,53 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,187	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,047%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,53 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,187	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>83)</p> <p>TMT00139</p>  <p>2,6-Dibromo-4-(6-methylbenzo[d]thiazol-2-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{14}H_{10}Br_2S_2$</p> <p>Peso molecular: 398.12</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>89.172 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0.328 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg; Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>---</td> <td>0.279</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1: BBB+; BB ratio <0.1: BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	89.172 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0.328 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg; Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	---	0.279	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1: BBB+; BB ratio <0.1: BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	89.172 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0.328 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg; Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	---	0.279	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1: BBB+; BB ratio <0.1: BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>84)</p> <p>191558</p>  <p>4-Aminobenzyl alcohol</p> <p>Sinónimos(s): 4-(Hydroxymethyl)aniline</p> <p>Fórmula linear: $H_2NC_6H_4CH_2OH$</p> <p>CAS No.: 623-04-1 Peso molecular: 123.15</p> <p>EC No.: 210-767-5 Beilstein No.: 2078680</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,693%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,119 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,738</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,693%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,119 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,738	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,693%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,119 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,738	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>85)</p> <p>663204</p>  <p>2-Morpholinoaniline</p> <p>Sinónimos(s): 2-(4-Morpholinyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{14}N_2O$</p> <p>CAS No.: 5585-33-1 Peso molecular: 178.23</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>86.875 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>0.223 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg; Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>++</td> <td>0.887</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1: BBB+; BB ratio <0.1: BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	86.875 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	0.223 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg; Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.887	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1: BBB+; BB ratio <0.1: BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	86.875 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	0.223 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg; Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.887	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1: BBB+; BB ratio <0.1: BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>86)</p> <p>364797</p>  <p>Disperse Orange 3</p> <p>Sinónimos(s): 4-(4-Hydroxyphenyl)azo)aniline</p> <p>Fórmula linear: $O_2NC_6H_4N=Nc_1ccc(O)cc1$</p> <p>CAS No.: 730-40-5 Peso molecular: 242.23</p> <p>EC No.: 211-984-8 Beilstein No.: 1842907</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>91,65%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,556 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>---</td> <td>0,156</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	91,65%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,556 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,156	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	91,65%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,556 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg; Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	---	0,156	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1: BBB+; Razão BB <0,1: BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										

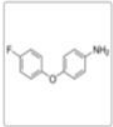
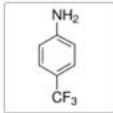
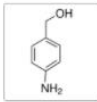

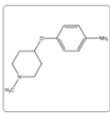
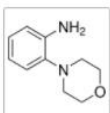
<p>87)</p> <p>A69188</p>  <p>4-Amino-4'-nitrodiphenyl sulfide</p> <p>Sinónimos(s): 4-(4-Nitrophenylthio)aniline</p> <p>Fórmula linear: <chem>H2NC6H4SC6H4NO2</chem></p> <p>CAS No.: 101-59-7 Peso molecular: 246.29</p> <p>EC No.: 202-957-1</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>94.324 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0.796 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>+</td> <td>0.544</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	94.324 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0.796 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0.544	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	94.324 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0.796 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0.544	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>88)</p> <p>773794</p>  <p>4-Aminophenyl propargyl ether</p> <p>Sinónimos(s): 4-(prop-2-ynyl)oxyaniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C9H9NO</chem></p> <p>CAS No.: 26557-78-8 Peso molecular: 147.17</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>86,089%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0.14 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0.722</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,089%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0.14 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0.722	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	86,089%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0.14 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0.722	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>89)</p> <p>251917</p>  <p>Sulfanilic Acid</p> <p>Sinónimos(s): Aniline-4-sulfonic acid, 4-Aminobenzenesulfonic acid, Sulfanilic acid</p> <p>Fórmula linear: <chem>4-(H2N)C6H4SO3H</chem></p> <p>CAS No.: 121-57-3 Peso molecular: 173.19</p> <p>EC No.: 204-482-5 Beilstein No.: 908765</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>84.63 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0.978 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>+</td> <td>0.629</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	84.63 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0.978 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0.629	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	84.63 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0.978 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0.629	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>90)</p> <p>556629</p>  <p>N-(4-Aminophenyl)piperidine</p> <p>Sinónimos(s): 4-(1-Piperidinyl)aniline, 4-(1-Piperidinyl)benzamine</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C11H16N2</chem></p> <p>CAS No.: 2359-60-6 Peso molecular: 176.26</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>85,777%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0.583 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,865</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,777%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0.583 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,865	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	85,777%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	0.583 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg Variedade: <0,07L/kg Confinado ao sangue, Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg Distribuído uniformemente; >0,7L/kg Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,865	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>91)</p> <p>15485</p>  <p>N-Boc-p-phenylenediamine</p> <p>Sinónimos(s): tert-Butyl-4-aminophenylcarbamate, 4-(tert-Butoxycarbonylamino)aniline</p> <p>Fórmula linear: <chem>(CH3)3COCONHC6H4NH2</chem></p> <p>CAS No.: 71026-66-9 Peso molecular: 208.26</p> <p>EC No.: 275-132-7 Beilstein No.: 2969618</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>84.353 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0.09 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>++</td> <td>0.723</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	84.353 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0.09 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.723	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	84.353 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0.09 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg. Range: <0.07L/kg Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0.07-0.7L/kg Evenly distributed; >0.7L/kg Bound to tissue components (e.g., protein, lipid)/highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0.723	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										

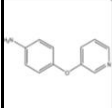
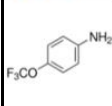
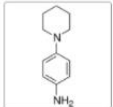
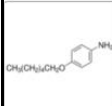
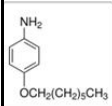
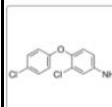
<p>92)</p> <p>53175</p>  <p>N-Boc-<i>m</i>-phenylenediamine</p> <p>Sinônimo(s): <i>tert</i>-Butyl-3-aminophenylcarbamate, 3-(<i>tert</i>-Butoxycarbonylamino)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): C₁₁H₁₅N₂O₂</p> <p>CAS No.: 68621-88-5 Peso molecular: 208.26</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>84,93%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>-0,061 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>++</td> <td>0,713</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	84,93%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	-0,061 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,713	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	84,93%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	-0,061 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	++	0,713	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>93)</p> <p>574686</p>  <p>3-Aminophenylboronic acid pinacol ester</p> <p>Sinônimo(s): 3-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): C₁₂H₁₉BN₂O₂</p> <p>CAS No.: 210907-84-9 Peso molecular: 219.09</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>75,862 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0,197 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg. Range: <0,07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>---</td> <td>0,299</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	75,862 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0,197 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg. Range: <0,07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	---	0,299	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	75,862 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0,197 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg. Range: <0,07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	---	0,299	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>94)</p> <p>753300</p>  <p>1-(2-Aminophenyl)-1H-pyrazole</p> <p>Sinônimo(s): 2-(1H-Pyrazol-1-yl)aniline, 1-(2-Aminophenyl)pyrazole</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): C₉H₉N₃</p> <p>CAS No.: 54705-91-8 Peso molecular: 159.19</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>88,895%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,033 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,555</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,895%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,033 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,555	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	88,895%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	0,033 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,555	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos. 										
<p>95)</p> <p>548278</p>  <p>N-(3-Aminophenyl)methanesulfonamide</p> <p>Sinônimo(s): 3-(Methylsulfonyl)aniline, 1-(3-Aminophenyl)methanesulfonamide, 3-(1H-Methylsulfonyl)aniline</p> <p>Empirical Formula (Hill Notation): C₇H₁₀N₂O₂S</p> <p>CAS No.: 37045-73-1 Peso molecular: 186.23</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>84,567 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td>-0,745 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg. Range: <0,07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>++</td> <td>0,748</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Plasma Protein Binding)	84,567 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	-0,745 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg. Range: <0,07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0,748	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
FPB (Plasma Protein Binding)	84,567 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	-0,745 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0,04-20L/kg. Range: <0,07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophilic; 0,07-0,7L/kg. Evenly distributed; >0,7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	++	0,748	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0,1. BBB+; BB ratio <0,1. BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>96)</p> <p>194212</p>  <p>2-Isopropenylaniline</p> <p>Formula linear: H₂C=C(CH₃)C₆H₄NH₂</p> <p>CAS No.: 52562-19-3 Peso molecular: 133.19</p> <p>EC No.: 258-008-7 Beilstein No.: 3081217</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>89,272%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,2 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,587</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	89,272%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,2 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,587	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos.
FPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	89,272%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	0,2 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0,04-20L/kg. Variedade: <0,07L/kg. Confinado ao sangue, Ligado à proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0,07-0,7L/kg. Distribuído uniformemente; >0,7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídio), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,587	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0,1. BBB+; Razão BB <0,1. BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; MW < 400-500; Sem ácidos. 										

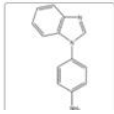
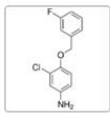
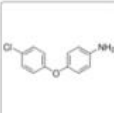
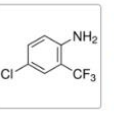
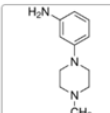
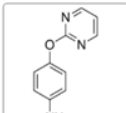
<p>97)</p> <p>476307</p>  <p>3,4'-Oxydianiline</p> <p>Fórmula linear: $O(C_6H_4)(NH_2)_2$</p> <p>CAS No.: 2657-87-6 Peso molecular: 200.24</p> <p>EC No.: 220-190-0</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Plasma Protein Binding)</td> <td>81.767 %</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. </td> </tr> <tr> <td>VD (Volume Distribution)</td> <td><0.098 L/kg</td> <td>0.04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophobic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Blood-Brain Barrier)</td> <td>+</td> <td>0.634</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. </td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Plasma Protein Binding)	81.767 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 	VD (Volume Distribution)	<0.098 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophobic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 	BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0.634	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids.
PPB (Plasma Protein Binding)	81.767 %	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significant with drugs that are highly protein-bound and have a low therapeutic index. 										
VD (Volume Distribution)	<0.098 L/kg	0.04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Optimal: 0.04-20L/kg Range: <0.07L/kg. Confined to blood, Bound to plasma protein or highly hydrophobic; 0.07-0.7L/kg. Evenly distributed; >0.7L/kg. Bound to tissue components (e.g., protein, lipid), highly lipophilic. 										
BBB (Blood-Brain Barrier)	+	0.634	<ul style="list-style-type: none"> BB ratio >=0.1 BBB+; BB ratio <0.1 BBB- These features tend to improve BBB permeation: H-bonds (total) < 8-10; MW < 400-500; No acids. 										
<p>98)</p> <p>219223</p>  <p>N,N-Dimethyl-1,3-phenylenediamine dihydrochloride</p> <p>Sinônimo(s): <i>N,N</i>-Dimethyl-<i>m</i>-phenylenediamine dihydrochloride, 3-Dimethylaminodaniline dihydrochloride, 3,4-dimethylaniline dihydrochloride</p> <p>Fórmula linear: $(C_6H_3)(N(CH_3)_2)(H_2) \cdot 2HCl$</p> <p>CAS No.: 3575-32-4 Peso molecular: 209.12</p> <p>Bolstein No.: 3694304</p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)</td> <td>83,751%</td> <td>90%</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. </td> </tr> <tr> <td>VD (Distribuição de Volume)</td> <td>0,248 L/kg</td> <td>0,04-20 L/kg</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Variedade: <0.07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0.07-0.7L/kg. Distribuído uniformemente; >0.7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. </td> </tr> <tr> <td>BBB (Barreira Sangue-Cérebro)</td> <td>+</td> <td>0,562</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. </td> </tr> </tbody> </table>	PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	83,751%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 	VD (Distribuição de Volume)	0,248 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Variedade: <0.07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0.07-0.7L/kg. Distribuído uniformemente; >0.7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 	BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,562	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos.
PPB (Ligação de Proteínas Plasmáticas)	83,751%	90%	<ul style="list-style-type: none"> Significativo com drogas que são altamente ligadas a proteínas e têm baixo índice terapêutico. 										
VD (Distribuição de Volume)	0,248 L/kg	0,04-20 L/kg	<ul style="list-style-type: none"> Ótimo: 0.04-20L/kg Variedade: <0.07L/kg. Confinado ao sangue. Ligado a proteína plasmática ou altamente hidrofílico; 0.07-0.7L/kg. Distribuído uniformemente; >0.7L/kg. Ligado a componentes teciduais (por exemplo, proteína, lipídios), altamente lipofílico. 										
BBB (Barreira Sangue-Cérebro)	+	0,562	<ul style="list-style-type: none"> Razão BB >=0.1 BBB+; Razão BB <0.1 BBB- Esses recursos tendem a melhorar a permeação do BBB: ligações de H (total) < 8-10; PM < 400-500; Sem ácidos. 										

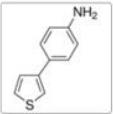
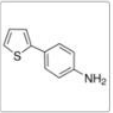
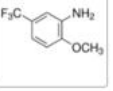
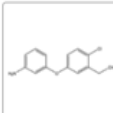
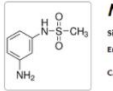
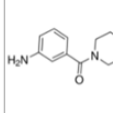
Anexo C - Score das moléculas.

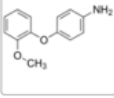
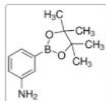
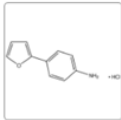


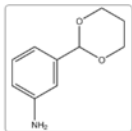
Classificação	Moléculas	BBB	Inibidor de quinase	Inibidor de enzima	Nota total
1) Molécula 49	<p>49] CDS014206</p>  <p>3-(1,3-oxazol-5-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_9H_9N_2O$ CAS No.: 157837-31-5 Peso molecular: 160.17</p>	$0,727 \times 3 = 2,181$	$0,94 \times 2 = 1,88$	$0,62 \times 1 = 0,62$	4,681
2) Molécula 47	<p>47] CBR00965</p>  <p>4-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}Cl_2N_2$ Peso molecular: 249.18</p>	$0,934 \times 3 = 2,802$	$0,67 \times 2 = 1,34$	$0,26 \times 1 = 0,26$	4,402
3) Molécula 55	<p>55] CBR01277</p>  <p>3-(Pyrrolidin-1-ylmethyl)aniline dihydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}Cl_2N_2$ Peso molecular: 249.18</p>	$0,929 \times 3 = 2,787$	$0,67 \times 2 = 1,34$	$0,25 \times 1 = 0,25$	4,377
4) Molécula 43	<p>43] CDS007538</p>  <p>3-(morpholin-4-ylmethyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{12}N_2O$ Peso molecular: 192.26</p>	$0,934 \times 3 = 2,802$	$0,66 \times 2 = 1,32$	$0,20 \times 1 = 0,20$	4,322
5) Molécula 27	<p>27] 217778</p>  <p>4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)aniline Sinónimos: 5-Amino-2-fluorobenzotrifluoride, 0,0,0,4-Tetrafluoro-m-toluidine Fórmula linear: $FC_9H_7(CF_3)NH_2$ CAS No.: 2357-47-3 Peso molecular: 179.11 EC No.: 219-095-7</p>	$0,844 \times 3 = 2,532$	$0,74 \times 2 = 1,48$	$0,24 \times 1 = 0,24$	4,255


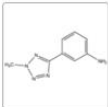

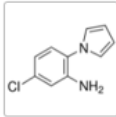
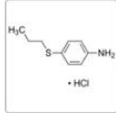
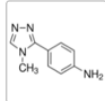
6) Molécula 01	<p>1) Produto n° 695408</p>  <p>4-(4-Fluorophenoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₂H₁₁FNO CAS No.: 36160-82-4 Peso molecular: 203.21</p>	0,889x3=2,667	0,67 x 2=1,34	0,23 x 1=0,23	4,237
7) Molécula 06	<p>5) 224936</p>  <p>4-(Trifluoromethyl)aniline Sinónimo(s): 4-Aminobenzotrifluoride, o,o,o-Trifluoro-p-toluidine Fórmula linear: CF₃C₆H₄NH₂ CAS No.: 455-14-1 Peso molecular: 161.12 EC No.: 207-236-5 Beilstein No.: 1564853</p>	0,853x 3=2,559	0,71 x 2=1,42	0,24 x 1=0,24	4,219
8) Molécula 84	<p>84) 191558</p>  <p>4-Aminobenzyl alcohol Sinónimo(s): 4-(Hydroxymethyl)aniline Fórmula linear: H₂(C₆H₄)CH₂OH CAS No.: 623-04-1 Peso molecular: 123.15 EC No.: 210-767-5 Beilstein No.: 2078680</p>	0,738x 3=2,214	0,78 x 2=1,56	0,40 x 1=0,40	4,174
9) Molécula 11	<p>1) 193135</p>  <p>3,5-Bis(trifluoromethyl)aniline Sinónimo(s): 5-Amino-o,o,o',o',o'-hexafluoro-m-xylene, o,o,o',o',o'-Hexafluoro-3,5-xylidine Fórmula linear: (CF₃)₂C₆H₃NH₂ CAS No.: 328-74-5 Peso molecular: 229.12 EC No.: 206-335-0 Beilstein No.: 654318</p>	0,907 3= 2,721	0,62 x 2=1,24	0,21 x 1=0,21	4,171
10) Molécula 33	<p>33) CBR00034</p>  <p>4-[(1-Methylpiperidin-4-yl)oxy]aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₂H₁₈N₂O CAS No.: 358789-72-7 Peso molecular: 206.28</p>	0,82x 3=2,487	0,69 x 2=1,38	0,30 x 1=0,30	4,167
11) Molécula 85	<p>85) 663204</p>  <p>2-Morpholinoaniline Sinónimo(s): 2-(4-Morpholinyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₀H₁₂N₂O CAS No.: 5585-33-1 Peso molecular: 178.23</p>	0,887x 3=2,661	0,66 x 2=1,32	0,18 x 1=0,18	4,161

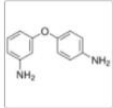
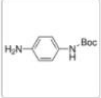
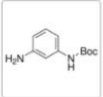
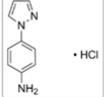
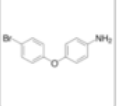
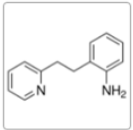
12) Molécula 13	<p>13) CBR00249</p>  <p>4-(Pyridin-3-yloxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{10}N_2O$ CAS No.: 80650-45-9 Peso molecular: 186.21</p>	0,688x 3=2,064	0,86 x 2=1,72	0,33 x 1=0,33	4,114
13) Molécula 19	<p>19) 337056</p>  <p>4-(Trifluoromethoxy)aniline Sinónimos(s): <i>o,o,o</i>-Trifluoro-<i>p</i>-anisidine Fórmula linear: $CF_3OC_6H_4NH_2$ CAS No.: 461-82-5 Peso molecular: 177.12 EC No.: 207-317-5 Beilstein No.: 2090209</p>	0,877 x 3=2,631	0,62 x 2=1,24	0,24 x 1=0,24	4,111
14) Molécula 90	<p>90) 556629</p>  <p>N-(4-Aminophenyl)piperidine Sinónimos(s): 4-(1-Piperidinil)anilina, 4-(1-Piperidinil)-benzamina Empirical Formula (Hill Notation): $C_{11}H_{16}N_2$ CAS No.: 2359-60-6 Peso molecular: 176.26</p>	0,865x 3=2,595	0,64 x 2=1,28	0,23 x 1=0,23	4,105
15) Molécula 18	<p>18) 222100</p>  <p>4-(Hexyloxy)aniline Fórmula linear: $CH_3(CH_2)_5OC_6H_4NH_2$ CAS No.: 39905-57-2 Peso molecular: 193.29 EC No.: 254-696-8</p>	0,892x 3=2,676	0,56 x 2=1,12	0,25 x 1=0,25	4,046
16) Molécula 34	<p>34) T340006</p>  <p>4-(HEPTYLOXY)ANILINE Fórmula linear: $C_{13}H_{21}NO$ CAS No.: 39905-44-7 Peso molecular: 207.31</p>	0,901x 3=2,703	0,54 x 2=1,08	0,24 x 1=0,24	4,023
17) Molécula 26	<p>26) 561274</p>  <p>3-Chloro-4-(4-chlorophenoxy)aniline Fórmula linear: $C_9H_9NH_2ClO_2$ CAS No.: 24900-79-6 Peso molecular: 254.11 EC No.: 246-519-8</p>	0,835x 3=2,505	0,64 x 2= 1,28	0,20 x 1=0,20	3,985

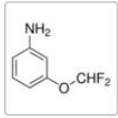
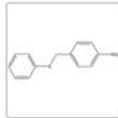

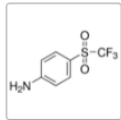
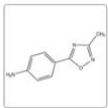
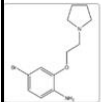
18) Molécula 23	23) CBR00351  4-(1H-Benzimidazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₃ H ₁₁ N ₃ CAS No.: 52708-36-8 Peso molecular: 209.25	0,749x 3=2,247	0,74 x 2=1,48	0,24 x 1=0,24	3,967
19) Molécula 56	56) CDS012378  3-chloro-4-(3-fluorobenzoyloxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₃ H ₁₁ ClFNO Peso molecular: 251.68	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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₂ H ₁₀ ClNO CAS No.: 101-79-1 Peso molecular: 219.67 EC No.: 202-976-5	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 Sinónimo(s): 4-Chloro-2,2,2-trifluoro-1-toluidine, 2-Amino-5-(trifluorometil)benzotrifluoride Fórmula linear: ClC ₆ H ₃ (CF ₃)NH ₂ CAS No.: 445-03-4 Peso molecular: 195.57 EC No.: 207-151-3	0,83 x 3=2,49	0,62 x 2=1,24	0,20 x 1= 0,20	3,93
22) Molécula 54	54) CDS004833  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) CDS006360  4-(2-Pyrimidinyl)oxyaniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₀ H ₈ N ₂ O Peso molecular: 187.20	0,641 x 3=1,923	0,80 x 2=1,60	0,34 x 1=0,34	3,863

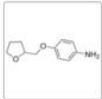
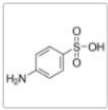

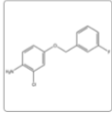
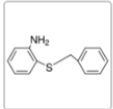
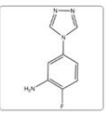
24) Molécula 12	12) 650080  4-(Thiophen-3-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₀ H ₉ NS CAS No.: 834884-74-1 Peso molecular: 175.25	0,601 x 3=1,803	0,85 x 2=1,7	0,31 x 1=0,31	3,813
25) Molécula 20	20) 654558  4-(Thiophen-2-yl)aniline Sinónimo(s): 4-(2-Thienyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₀ H ₉ NS CAS No.: 70010-48-9 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	29) 336599  2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline Sinónimo(s): 6-Methoxy- <i>o,o,p</i> -trifluoro- <i>m</i> -toluidine Fórmula linear: CH ₃ OC ₆ H 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	05) PH016744  3-(4-Chloro-3-ethylphenoxy)aniline Fórmula linear: C ₁₄ H ₁₄ O ₂ NCl 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) 648278  N-(3-Aminophenyl)methanesulfonamide Sinónimo(s): S-(3-Aminophenyl)sulfonil(anilina), N-(3-Aminophenyl)methanesulfonamida, S-(3-Aminofenil)sulfonil(a) Empirical Formula (Hill Notation): C ₇ H ₁₀ N ₂ O ₂ S CAS No.: 37045-73-1 Peso molecular: 186.23	0,748 x 3=2,244	0,65 x 2= 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 ₂ O Peso molecular: 204.274	0,82 x 3=2,46	0,57 x 2=1,14	0,20 x 1=0,20	3,8

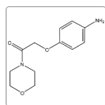
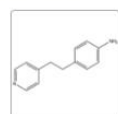
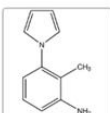
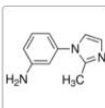
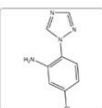

30) Molécula 09	<p>93) CBR01173</p>  <p>4-(2-Methoxyphenoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{13}H_{13}NO_2$ CAS No.: 13066-01-8 Peso molecular: 215.25</p>	0,78 x 3=2,34	0,61 x 2=1,22	0,23 x 1=0,23	3,79
31) Molécula 93	<p>93) 574686</p>  <p>3-Aminophenylboronic acid pinacol ester Sinónimos: 3-(4,4,5,5-Tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anilina Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{15}BNO_2$ CAS No.: 210907-84-9 Peso molecular: 219,09</p>	0,299 x 3=0,897	0,94 x 2=1,88	1,01 x 1= 1,01	3,787
32) Molécula 44	<p>44) CBR00754</p>  <p>4-(2-Furyl)aniline hydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{10}ClNO$ Peso molecular: 195.65</p>	0,785 x 3=2,355	0,60 x 2=1,2	0,16 x 1=0,16	3,715
33) Molécula 68	<p>68) PH01624B</p>  <p>4-[(E)-2-(2-Pyridinyl)ethenyl]aniline dihydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): $C_{12}H_{10}Cl_2N_2$ Peso molecular: 269.17</p>	0,628x3=1,884	0,75 x 2=1,5	0,33 x 1=0,33	3,714
34) Molécula 74	<p>74) PH019167</p>  <p>(E)-4-(2-(Pyridin-2-yl)vinyl)aniline hydrochloride Formula linear: $C_{12}H_{12}ClN$</p>	0,628x3=1,884	0,75 x 2=1,5	0,33 x 1=0,33	3,714
35) Molécula 60	<p>60 TMT00020</p>  <p>3-(1,3-Dioxan-2-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{10}H_{13}NO_2$ Peso molecular: 179.22</p>	0,782 x 3=2,346	0,52 x 2=1,04	0,29 x 1=0,29	3,676

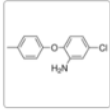
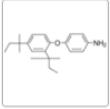
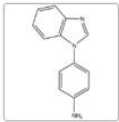
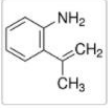
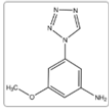
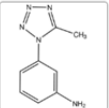
36) Molécula 67	67) CDS019943  3-Chloro-4-(3,5-dimethyl-1-piperidinyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₃ H ₁₉ ClN ₂ Peso molecular: 238,76	0,89 x 3=2,67	0,46 x 2=0,92	0,06 x 1=0,06	3,65
37) Molécula 63	63) CBR02060  3-(2-Methyl-2H-tetrazol-5-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₂ H ₁₃ N ₂ 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) BBO000510  4-(2-(Pyrrolidin-1-yl)ethyl)aniline hydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₂ H ₁₉ N ₂ ·HCl Peso molecular: 226,75	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 Fórmula linear: C ₁₀ H ₉ ClN 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) CBR01435  4-(Propylthio)aniline hydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): C ₉ H ₁₄ ClN ₁ S 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) CDS015579  4-(4-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₉ H 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

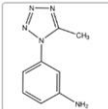
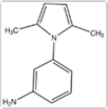
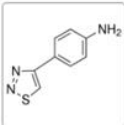

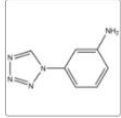
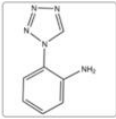
42) Molécula 97	<p>97) 476307</p>  <p>3,4'-Oxydianiline Fórmula linear: <chem>O=Cc1ccc(Oc2ccc(N)cc2)cc1</chem> CAS No.: 2657-87-6 Peso molecular: 200.24 EC No.: 220-190-0</p>	0,634 x 3=1,902	0,69 x 2= 1,38	0,27 x 1=0,27	3,552
43) Molécula 91	<p>91) 15485</p>  <p>N-Boc-<i>p</i>-phenylenediamine Sinónimo(s): <i>tert</i>-Butyl-4-aminophenylcarbamate, 4-(<i>tert</i>-Butoxycarbonylamino)aniline Fórmula linear: <chem>CC(C)(C)OC(=O)NC1=CC=C(N)C=C1</chem> CAS No.: 71026-66-9 Peso molecular: 208.26 EC No.: 275-132-7 Beilstein No.: 2969618</p>	0,723 x 3=2,169	0,56 x 2=1,12	0,26 x 1=0,26	3,549
44) Molécula 92	<p>92) 53175</p>  <p>N-Boc-<i>m</i>-phenylenediamine Sinónimo(s): <i>tert</i>-Butyl-3-aminophenylcarbamate, 3-(<i>tert</i>-Butoxycarbonylamino)aniline Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C11H15N2O2</chem> CAS No.: 68621-88-5 Peso molecular: 208.26</p>	0,713 x 3=2,139	0,57 x 2=1,14	0,25 x 1=0,25	3,529
45) Molécula 59	<p>59) CBR01115</p>  <p>4-(1H-Pyrazol-1-yl)aniline hydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C9H10N4</chem> Peso molecular: 195.65</p>	0,519 x 3=1,557	0,80 x 2= 1,60	0,35 x 1=0,35	3,507
46) Molécula 08	<p>8) 695394</p>  <p>4-(4-Bromophenoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C12H10BrNO</chem> CAS No.: 31465-35-7 Peso molecular: 264.12</p>	0,706 x 3=2,109	0,60 x 2=1,20	0,18 x 1=0,18	3,489
47) Molécula 52	<p>52) CDS00574</p>  <p>2-[2-(2-Pyridinyl)ethyl]aniline Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C13H14N2</chem> Peso molecular: 198.26</p>	0,545 x 3=1,635	0,74 x 2=1,48	0,36 x 1=0,36	3,475

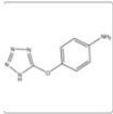
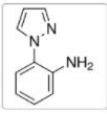
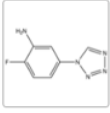
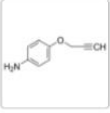
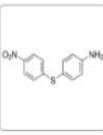

48) Molécula 17	17) 566446  3-(Difluoromethoxy)aniline Fórmula linear: <chem>CHF2OC6H4NH2</chem> CAS No.: 22236-08-4 Peso molecular: 159.13	0,784 x 3=2,352	0,46 x 2=0,92	0,20 x 1=0,20	3,472
49) Molécula 14	14) KOB0081  4-[(Phenylsulfonyl)methyl]aniline Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C12H12NS</chem> 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) VBP00135  3-(4-Methyl-1H-imidazol-1-yl)-5-(trifluoromethyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C12H12F3N2</chem> CAS No.: 641571-11-1 Peso molecular: 241.21	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 Fórmula linear: <chem>CF3SO2C6H4NH2</chem> CAS No.: 473-27-8 Peso molecular: 225.19	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 Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C6H7N3O</chem> CAS No.: 76635-31-9 Peso molecular: 175.19	0,695 x 3=2,085	0,55 x 2=1,1	0,22 x 1=0,22	3,405
53) Molécula 80	80) DTV000862  4-Bromo-2-(2-(pyrrolidin-1-yl)ethoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): <chem>C12H17BrN2O</chem> Peso molecular: 285.18	0,661x3=1,983	0,63 x 2=1,26	0,16 x 1=0,16	3,403

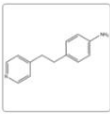

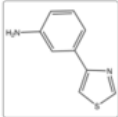
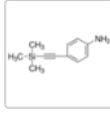
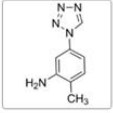
54) Molécula 02	2) CBR01220  4-(Tetrahydrofuran-2-ylmethoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₁ H ₁₃ NO ₂ CAS No.: 91246-63-8 Peso molecular: 193,24	0,836 x 3=2,508	0,40 x 2=0,8	0,08 x 1=0,08	3,388
55) Molécula 89	89) 251917  Sulfanilic Acid Sinónimos: Aniline-4-sulfonic acid, 4-Aminobenzenesulfonic acid, Sulfanilic acid Fórmula linear: 4-(H ₂ N)C ₆ H ₄ SO ₃ H CAS No.: 121-57-3 Peso molecular: 173,19 EC No.: 204-482-5 Beilstein No.: 908765	0,629 x 3=1,887	0,55 x 2=1,1	0,39 x 1= 0,39	3,377
56) Molécula 98	88) 219223  N,N-Dimethyl-1,3-phenylenediamine dihydrochloride Sinónimos: N,N-Dimethyl-m-phenylenediamine dihydrochloride, 2-(Dimethylamino)aniline dihydrochloride, 2-(dimethylamino)aniline dihydrochloride Fórmula linear: (CH ₃) ₂ N(C ₆ H ₃)NH ₂ ·2HCl CAS No.: 3575-32-4 Peso molecular: 209,12 Beilstein No.: 3694384	0,562 x 3=1,686	0,73 x 2=1,46	0,23 x 1=0,23	3,376
57) Molécula 53	83) YBP00085  2-Chloro-4-(3-fluorobenzoyloxy)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 S CAS No.: 6325-92-4 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	40) CBR00066  2-Fluoro-5-(4H-1,2,4-triazol-4-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₈ H ₇ FN 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


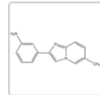

60) Molécula 38	<p>68)</p> <p>CBR00087</p>  <p>4-(2-Morpholin-4-yl-2-oxoethoxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₂H₁₆N₂O₃ CAS No.: 76870-09-2 Peso molecular: 236.27</p>	0,781 x 3=2,343	0,45 x 2=0,9	0,06 x 1=0,06	3,303
61) Molécula 73	<p>73)</p> <p>TMT00306</p>  <p>4-(2-(Pyridin-4-yl)ethyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₃H₁₄N₂ CAS No.: 6318-70-3 Peso molecular: 198.26</p>	0,532x3=1,596	0,69 x 2=1,38	0,31 x 1=0,31	3,286
62) Molécula 39	<p>69)</p> <p>CBR00524</p>  <p>2-Methyl-3-(1H-pyrrol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₁H₁₂N₂ CAS No.: 137352-75-1 Peso molecular: 172.23</p>	0,69 x 3=2,07	0,55 x 2=1,1	0,11 x 1=0,11	3,28
63) Molécula 66	<p>66)</p> <p>CDS017202</p>  <p>3-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₀H₁₁N₃ Peso molecular: 173.21</p>	0,534 x 3=1,602	0,69 x 2=1,38	0,29 x 1=0,29	3,272
64) Molécula 51	<p>61)</p> <p>CBR00446</p>  <p>5-Chloro-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₉H₇ClN₄ CAS No.: 450399-92-5 Peso molecular: 194.62</p>	0,719x3=2,157	0,54 x 2=1,08	0,01 x 1=0,01	3,247
65) Molécula 70	<p>70)</p> <p>S629073</p>  <p>2-(2-(4-TERT-OCTYLPHENOXY)ETHOXY)ANILINE Fórmula linear: C₂₂H₃₂O₂ CAS No.: 114203-82-6 Peso molecular: 341.498</p>	0,769 x 3=2,307	0,38 x 2=0,76	0,12 x 1=0,12	3,187

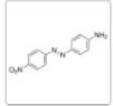
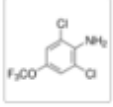
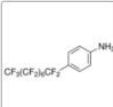
66) Molécula 65	65) S508098  5-CHLORO-2-(P-TOLYLOXY)ANILINE Fórmula linear: C ₁₂ H ₁₂ ClNO CAS No.: 16824-48-9 Peso molecular: 233.7	0,647 x 3=1,941	0,55 x 2=1,1	0,13 x 1=0,13	3,171
67) Molécula 61	61) S987107  4-(2,4-DI-TERT-PENTYLOXY)ANILINE Fórmula linear: C ₂₂ H ₃₁ NO CAS No.: 112322-87-9 Peso molecular: 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 Fórmula linear: H ₂ C=C(CH ₃)C ₆ H ₄ NH ₂ 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) CBR00344  3-Methoxy-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₈ H ₉ N ₃ O 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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₈ H ₉ N ₃ 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	<p>5) CBR00266</p>  <p>3-(5-Methyl-1H-tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₈H₉N₅ CAS No.: 500701-24-6 Peso molecular: 175.19</p>	0,744 x 3=2,232	0,36 x 2=0,72	0,06 x 1 =0,06	3,012
73) Molécula 41	<p>1) CBR00198</p>  <p>3-(2,5-Dimethyl-1H-pyrrol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₁₂H₁₄N₂ CAS No.: 247225-33-8 Peso molecular: 186.25</p>	0,723x3=2,169	0,45 x 2=0,9	0,02 x 1=0,02	3,089
74) Molécula 57	<p>7) CDS014347</p>  <p>4-(1,2,3-thiadiazol-4-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₈H₇N₃S Peso molecular: 177.23</p>	0,258x3=0,774	0,87 X 2=1,74	0,47 X 1=0,47	2,984
75) Molécula 48	<p>8) PH016685</p>  <p>2-[5-(3,4-Dichlorophenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl]aniline Formula linear: C₁₄H₉O₂Cl₂ CAS No.: 175135-30-5</p>	0,655x3=1,965	0,41 x 2=0,82	0,19 x 1=0,19	2,975
76) Molécula 04	<p>4) CBR01855</p>  <p>3-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₇H₇N₅ CAS No.: 14213-12-8 Peso molecular: 161.16</p>	0,646 x 3=1,938	0,49 x 2= 0,98	0,05 x 1=0,05	2,968
77) Molécula 24	<p>24) CBR00378</p>  <p>2-(1H-Tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₇H₇N₅ CAS No.: 14210-51-6 Peso molecular: 161.16</p>	0,673 x 3=2,019	0,47 x 2=0,94	-0,02 x 1= - 0,02	2,939

78) Molécula 25	<p>25) CBR00260</p>  <p>4-(1H-Tetrazol-5-yloxy)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₇H₇N₃O CAS No.: 467226-44-4 Peso molecular: 177.16</p>	0,461 x 3=1,383	0,66 x 2=1,32	0,23 x 1=0,23	2,933
79) Molécula 94	<p>94) 753300</p>  <p>1-(2-Aminophenyl)-1H-pyrazole Sinónimos: 2-(1H-Pyrazol-1-yl)aniline, 1-(2-Aminophenyl)pyrazole Empirical Formula (Hill Notation): C₈H₈N₃ CAS No.: 54705-91-8 Peso molecular: 159.19</p>	0,555 x 3=1,665	0,60 x 2= 1,2	0,04 x 1=0,04	2,905
80) Molécula 62	<p>62) CBR02023</p>  <p>2-Fluoro-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C₈H₇N₃O Peso molecular: 127.14</p>	0,583 x 3=1,749	0,51 x 2=1,02	0,01 x 1=0,01	2,779
81) Molécula 88	<p>88) 773794</p>  <p>4-Aminophenyl propargyl ether Sinónimos: 4-(prop-2-ynyl)oxyaniline Empirical Formula (Hill Notation): C₉H₉NO CAS No.: 26557-78-8 Peso molecular: 147.17</p>	0,722 x 3=1,166	0,62 x 2=1,24	0,27 x 1=0,27	2,676
82) Molécula 87	<p>87) A69188</p>  <p>4-Amino-4'-nitrodiphenyl sulfide Sinónimos: 4-(4-Nitrophenylthio)aniline Fórmula lineal: H₂N-C₆H₄-S-C₆H₄-NO₂ CAS No.: 101-59-7 Peso molecular: 246.29 EC No.: 202-957-1</p>	0,544 x 3=1,632	0,43 x 2=0,86	0,17 x 1=0,17	2,662
83) Molécula 81	<p>81) CBR00697</p>  <p>4-[(5-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)methyl]aniline dihydrochloride Empirical Formula (Hill Notation): C₉H₉Cl₂N₃ Peso molecular: 261.15</p>	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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₃ H ₁₄ N ₂ 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) CDS005503  4-(4'-aminomethyl)phenyl-1-N-Boc-aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₉ H ₂₂ N ₂ O ₂ 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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₉ H ₈ N ₂ S 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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₉ H ₈ N ₂ S 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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₁ H ₁₂ NSi 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) CBR01393  2-Methyl-5-(1H-tetrazol-1-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₈ H ₈ N ₄ 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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₀ H ₁₀ N ₂ S CAS No.: 25021-49-2 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) TMT00139  2,6-Dibromo-4-(6-methylbenzo[d]thiazol-2-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₄ H ₁₀ Br ₂ N ₂ S 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) CDS008062  4-[4-(4-fluorophenyl)-1,3-thiazol-2-yl]aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₅ H ₁₁ FN ₂ S 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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₄ H ₁₂ N ₃ Peso molecular: 223.27	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 Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₄ H ₁₂ N ₃ Peso molecular: 223.27	0,128 x 3=0,384	0,53 x 2=1,06	0,28 x 1=0,28	1,724
95) Molécula 82	82) TMT00114  4-Chloro-3-(5,7-dimethylbenzo[d]oxazol-2-yl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): C ₁₇ H ₁₅ ClN ₂ O Peso molecular: 272.73	0,187x3=0,561	0,40 x 2=0,8	0,18 x 1=0,18	1,544

96) Molécula 86	<p>36) 364797</p>  <p>Disperse Orange 3 Sinónimo(s): 4-(4-Nitrophenyl)azobenzene Fórmula linear: $O_2NC_6H_4N=N(C_6H_4)NH_2$ CAS No.: 730-40-5 Peso molecular: 242,23 EC No.: 211-984-8 Beilstein No.: 1842907</p>	$0,156 \times 3 = 0,468$	$0,45 \times 2 = 0,9$	$0,12 \times 1 = 0,12$	1,488
97) Molécula 03	<p>3) 429899</p>  <p>2,6-Dichloro-4-(trifluoromethoxy)aniline Fórmula linear: $O_2C_6H_2Cl_2OCF_3NH_2$ CAS No.: 99479-66-0 Peso molecular: 246,01</p>	não foi possível calcular	$0,39 \times 2 = 0,78$	$0,21 \times 1 = 0,21$	0,99
98) Molécula 15	<p>15) 28623</p>  <p>4-(Heptafluorooctyl)aniline Sinónimo(s): 4-(Perfluorooctyl)aniline Empirical Formula (Hill Notation): $C_{14}H_9F_{17}N$ CAS No.: 83766-52-3 Peso molecular: 511,18</p>	não foi possível calcular	$-0,34 \times 2 = -0,68$	$-0,36 \times 1 = -0,36$	-1,04