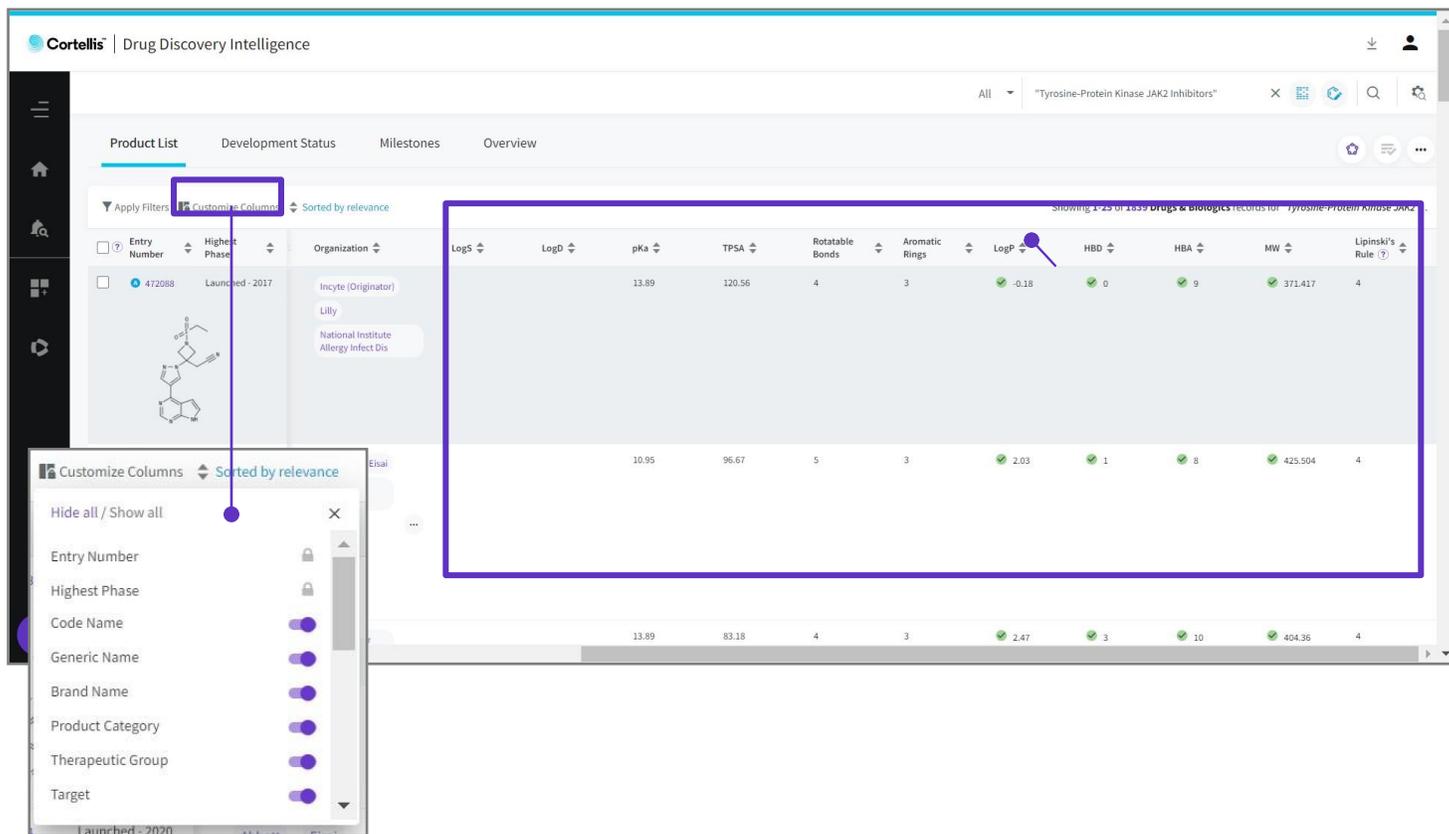


## Encontre dados físico-químicos para seu composto

Você pode precisar identificar estruturas com boa solubilidade ou que estejam em conformidade com as 5 Regras de Lipinski. Com o Cortellis Drug Discovery Intelligence você pode classificar as propriedades da estrutura físico-química calculadas pela tecnologia ChemAxon™.

1. Executar uma pesquisa de composto/estrutura em **Drogas e Biológicos**.
2. Na página de resultados, encontre até 10 propriedades físico-químicas dos compostos à direita da tabela. Use as opções de classificação na parte superior de cada coluna para organizar seus resultados conforme necessário.



The screenshot displays the Cortellis Drug Discovery Intelligence interface. The main table shows drug properties for "Tyrosine-Protein Kinase JAK2 Inhibitors". The table columns include LogS, LogD, pKa, TPSA, Rotatable Bonds, Aromatic Rings, LogP, HBD, HBA, MW, and Lipinski's Rule. A "Customize Columns" dialog box is open, showing a list of properties with toggle switches to show or hide them. The dialog box is titled "Customize Columns" and "Sorted by relevance".

LogS	LogD	pKa	TPSA	Rotatable Bonds	Aromatic Rings	LogP	HBD	HBA	MW	Lipinski's Rule
		13.89	120.56	4	3	-0.18	0	9	371.417	4
		10.95	96.67	5	3	2.03	1	8	425.504	4
		13.89	83.18	4	3	2.47	3	10	404.36	4

### 3. As 5 Regras de Lipinski

A **regra de Lipinski** afirma que a absorção ou permeação de uma molécula é mais provável quando as 4 propriedades abaixo têm as seguintes faixas de valor:

$$\text{LogP} \leq 5 + \text{HBD} \leq 5 + \text{HBA} \leq 10 + \text{MW} \leq 500 \text{ g/mol}$$

LogP	HBD	HBA	MW	Lipinski's Rule
✓ -0.18	✓ 0	✓ 9	✓ 371.417	4

Identifique facilmente as estruturas que passam pela regra de Lipinski indicada por **4 marcas de verificação verdes**