**FICHA DE CADASTRO DE NOVAS SUBSTÂNCIAS NA QUIMIOTECA DO LASSBIO**



**Fórmula Estrutural:**

**Nomenclatura:**

**Fórmula molecular:**

**Ponto de fusão (corrigido?):**

**Grau de pureza (equipamento, método e condições empregados):**

**Métodos espectroscópicos empregados na elucidação estrutural (anexá-los ao cadastro):**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **RMN-1H (400 Mhz)** | **RMN-13C (100 Mhz)** | **IR** | **UV** | **MS (Alta resolução ?)** | **Outros métodos** |
|  |  |  |  |  |  |

**Parâmetros indicativos de propriedades “*Drug-Like*” definidos *In Silico* (Percepta 2012 – ACD Labs):**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **PM** |  | **PSA** |  |
| **cLogP** |  | **Número de ligações com livre rotação** |  |
| **ALH** |  | **hERG (probabilidade de inibição a 10 µM)** |  |
| **DLH** |  | **Solubilidade aquosa (pH = 7,4)** |  |

PM – peso molecular; cLogP – coeficiente de lipofilicidade calculado; ALH – Aceptor de ligação de Hidrogênio; DLH – Doador de ligação de Hidrogênio; PSA – Área de superficie polar.

**Dados definidos experimentalmente, caso existam (adicione novas linhas quando for necessário):**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Solubilidade aquosa** |  | **LogP ou LogD** |  |

**Solvente no qual a amostra para cadastro foi cristalizada:**

**Aspecto físico da amostra:**

**Observação sobre a estabilidade da amostra:**

**Alvo molecular e/ou perfil farmacológico planejado:**

**Quantidade da amostra cedida no ato do cadastro (condições especiais para potenciais inibidores de cinases – não ultrapassar 10 mg por frasco):**

**Data da solicitação do cadastro:**

**Solicitante do cadastro:** \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(nome legível) (assinatura)

**Auditor do cadastro:** \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(nome legível) (assinatura)

**Coordenador do LASSBio:** \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(nome legível) (assinatura)

# LASSBio-XXXX

**Número do composto cadastrado:**