

La règle des cinq de Lipinski, des extensions célèbres et des exceptions célèbres

Violeta Ivanović¹, Miroslav Rančić¹, Biljana Arsić¹, Aleksandra Pavlović¹

1- Université de Niš, Faculté des sciences naturelles et des mathématiques, Département de chimie, Višegradska 33, 18000 Niš, République de Serbie

Résumé

Les modèles mathématiques montrent des dépendances qualitatives et quantitatives entre la structure, les propriétés physico-chimiques et les activités des composés étudiés. Il existe de différentes règles pour prédire une bonne biodisponibilité et l'une des plus connues est la règle de Lipinski. La règle se rapporte aux propriétés moléculaires importantes pour la pharmacocinétique du médicament dans le corps humain, à savoir : absorption, distribution, métabolisme et excrétion (angl. ADME). À part de la règle de Lipinski, il y a des combinaisons variées des critères qui sont des prédicteurs importants de la perméabilité. Une règle supplémentaire a été proposée par Veber qui comparait la biodisponibilité orale du composé et la perméabilité du composé à la flexibilité moléculaire.

Mots-clés: absorption, accepteurs, activité biologique, donateurs, exceptions