

Lipinskis Fünferregel, berühmte Erweiterungen und berühmte Ausnahmen

Violeta Ivanović¹, Miroslav Rančić¹, Biljana Arsić¹, Aleksandra Pavlović¹

1- Universität Niš, Fakultät für Naturwissenschaften und Mathematik, Abteilung für Chemie, Višegradaska 33, 18000 Niš, Republik Serbien

ABSTRAKT

Mathematische Modelle zeigen qualitative und quantitative Abhängigkeiten zwischen Struktur, physikalisch-chemischen Eigenschaften und Aktivitäten der untersuchten Verbindungen. Es gibt verschiedene Regeln für die Vorhersage einer guten Bioverfügbarkeit, und eine der bekanntesten ist die Lipinski-Regel. Die Regel bezieht sich auf die molekularen Eigenschaften, die für die Pharmakokinetik eines Arzneimittels im menschlichen Körper wichtig sind: Absorption, Distribution, Metabolismus und Elimination (ADME). Zusätzlich zur Lipinski-Regel gibt es verschiedene Kriterienkombinationen, die wichtige Prädiktoren für die Permeabilität sind. Eine zusätzliche Regel wurde von Veber vorgeschlagen. Er verglich die orale Bioverfügbarkeit der Verbindung und die Permeabilität der Verbindung mit der molekularen Flexibilität.

Schlüsselwörter: Absorption, Akzeptoren, biologische Aktivität, Donatoren, Ausnahmen