

## Capitolo 2

---

1. Escrezione, in particolare se idrosolubile  
Rapidamente metabolizzato  
Rapidamente ripartito nei tessuti di deposito.
2. Acido coniugato: il prodotto della base più acqua  
Base coniugata: il prodotto di un acido più acqua
3. 9% a pH 3,8  
91% a pH 4,8
4. Con un  $pK_a$  di 7,53 e un pH fisiologico di 7,4, la selegilina sarebbe approssimativamente al 50% nella forma ionizzata. Quindi sarebbe più solubile a pH 8,5 e meno a pH 6,5.
5. QSAR                   relazioni quantitative struttura-attività  
CADD                   *computer-aided drug design*  
CoMFA                  analisi comparativa dei campi molecolari  
CoMSIA                 analisi comparativa di indici di similarità molecolare  
Log P                   coefficiente di ripartizione, solitamente in ottanolo-acqua  
Log D                   coefficiente di distribuzione in un sistema ottanolo-acqua che tiene conto del fatto che una porzione di molecola può essere nello stato ionizzato  
HTS                     *high-throughput screening*
6. van der Waals, dipolo-dipolo, idrogeno, ionico, covalente
7. La Regola del Cinque di Lipinski è un set di regole che definisce la *drug likeness* ed è utilizzato per cercare in un database chimico i composti che sarebbero candidati non adatti allo sviluppo.

