

TEMA 1.- Conceptos Básicos

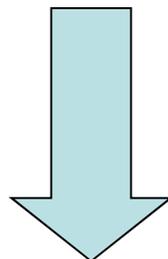
Compuestos Orgánicos Bioactivos

Daniel Collado Martín

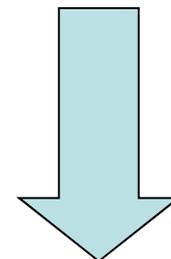
Departamento de Química Orgánica

Facultad de Ciencias

Compuesto Orgánico Bioactivo

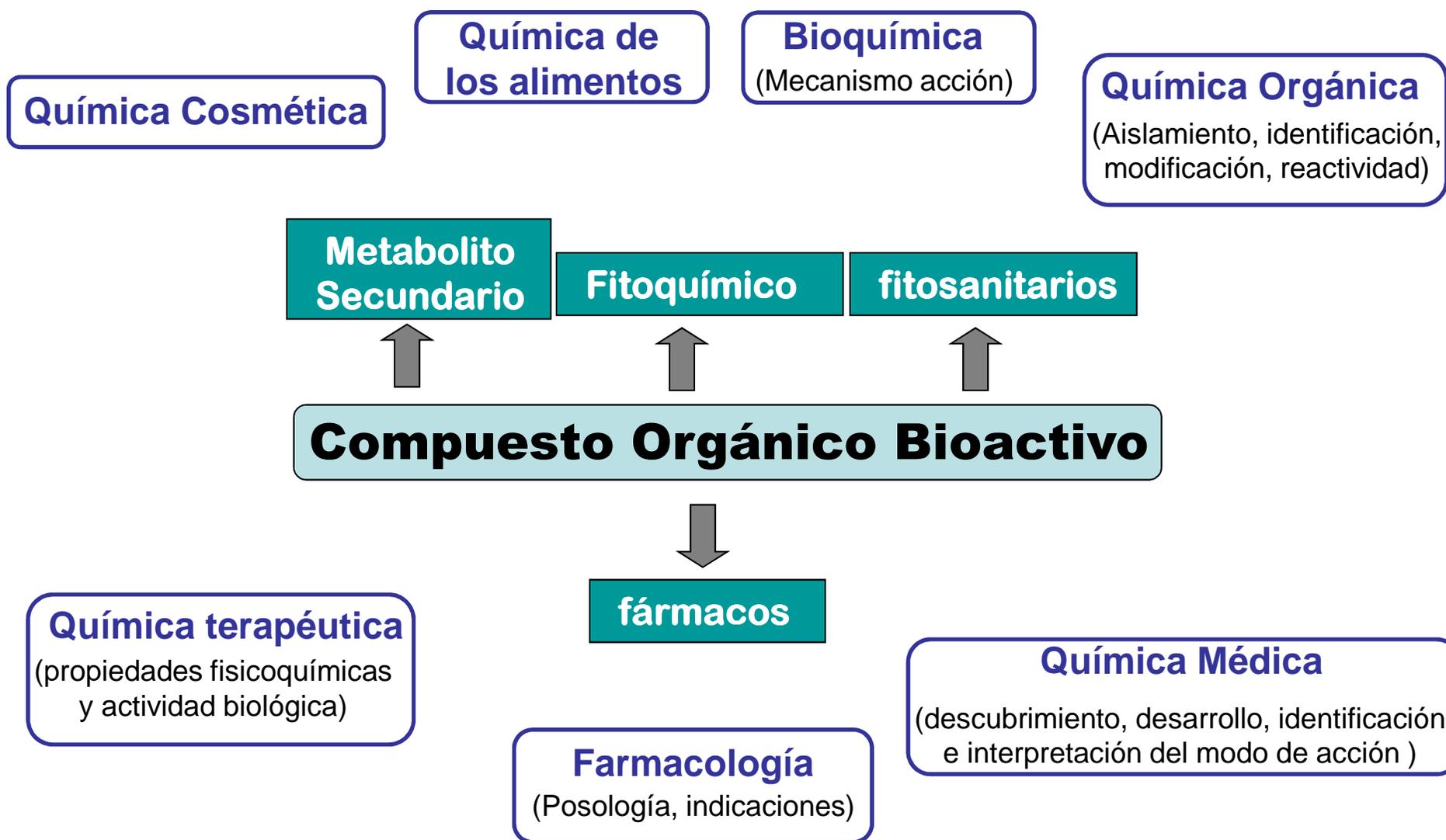


Los **compuestos orgánicos** son sustancias químicas que contienen carbono, hidrógeno y otros heteroátomos unidos mediante enlaces covalentes. Pueden ser de origen natural o artificial.



El adjetivo **bioactivo** procede del griego *bios*, vida y *activus*, con energía, y hace referencia a la generación de un efecto o la producción de una reacción en un tejido vivo por interacción con una sustancia.

Campos de aplicación



fármacos

Toda aquella sustancia pura y estructura química definida, de origen natural o sintético, que posee acción biológica que puede o no ser aprovechado por sus efectos terapéuticos.

droga

Materia prima de origen natural que posee uno o varios principios activos y que no ha sufrido manipulación química salvo la necesaria para su conservación.

medicamento

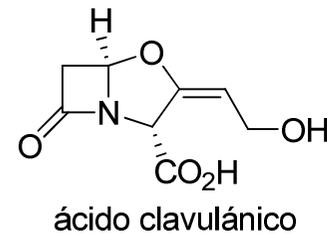
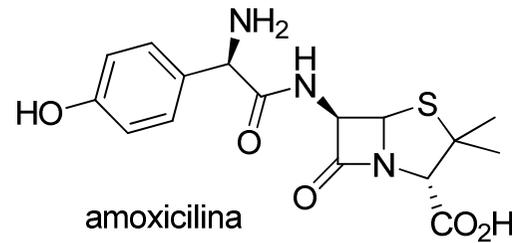
La combinación de un fármaco o varios y sus asociaciones o combinaciones destinadas a ser utilizadas en personas o animales se denomina *medicamento*. Sus propiedades están orientadas hacia el mejor efecto farmacológico de sus componentes con el fin de prevenir, aliviar o mejorar enfermedades, o para modificar estados fisiológicos.

especialidad farmacéutica

Es un medicamento de composición definida y dosificación concreta listo para ser usado. Es el preparado completo del medicamento con excipientes que se adquiere en farmacias.

Ejemplo

fármaco



medicamento

Clamoxyl®

Antibiótico β -lactámico (bactericida):
inhiben la formación de la membrana
celular. La amoxicilina no resiste la
acción hidrolítica de las β -lactamasas
de muchos estafilococos.

**especialidad
farmacéutica**



Medicamento en formato blíster
Fuente: <http://de.wikipedia.org>

CLASIFICACIÓN

fármacos

a) Efecto farmacológico

Los fármacos son agrupados según el efecto biológico que provocan, por ejemplo, analgésicos, antipsicóticos, antihipertensivos, antiasmáticos, antibióticos, etc.

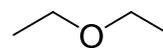
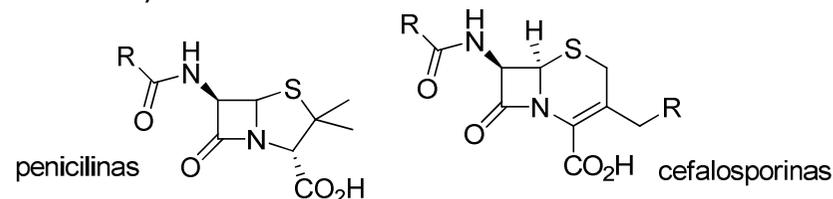
b) Estructura química

Muchos fármacos que poseen un esqueleto común son agrupadas juntos, por ejemplo penicilinas, barbitúricos, opiáceos, esteroides, catecolaminas, etc.

Fármacos estructuralmente específicos: su acción está muy relacionada con su estructura y pequeños cambios en la misma dan a lugar a compuestos inactivos o con una acción totalmente diferente.

Fármacos estructuralmente inespecíficos: su acción no está relacionada directamente con su estructura, o esta relación se desconoce. Su acción se explica por su capacidad de modificar las propiedades fisicoquímicas de un medio biológico normalmente la membrana celular.

Antibióticos β -lactámicos



éter



haloalcanos

fármacos

c) Por el sistema biológico objetivo

Los fármacos son clasificados según el sistema biológico objetivo.

1. Agentes quimioterápicos

Aquellos que se usan para la defensa del organismo frente a microorganismos o parásitos. Su acción se centra en alterar los procesos bioquímicos de estos microorganismos aprovechando las diferencias existentes entre estos y los del organismo humano. En el tratamiento contra el cáncer se puede considerarse las células cancerosas como elementos externos puesto que tienen un metabolismo distinto al resto de células normales.

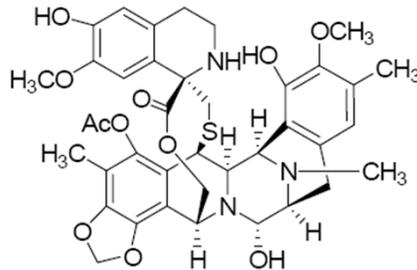
2. Agentes farmacodinámicos

Modulan las funciones fisiológicas y por tanto afectan al organismo humano. Podemos encontrarlos hormonas (insulina), neurotransmisores (anestésicos, analgésicos, antihistamínicos, colinérgicos, etc.), esteroides (afectan al sistema cardiovascular).

d) Por el sitio de la acción

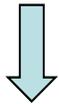
Los fármacos son agrupados según la enzima o receptor con el cual se relacionan. Por ejemplo, anticolinesterasas son un grupo de medicinas que actúan por la inhibición de la enzima acetilcolinesterasa.

fármacos



Ectenaiscidina

ET-743 (Pharmamar)



Yondelis®

1.- Nombres "con propietario"

Nombres registrados bajo patentes por empresas farmacéuticas.

- Códigos de fabricante: es una combinación de letras y cifras que utilizan las compañías farmacéuticas y laboratorios para identificar cada uno de los compuestos ensayados.
- Nombres comerciales: este nombre suele corresponder a un medicamento y no a un fármaco, ya que puede incluir uno o varios principios activos, además de los excipientes.

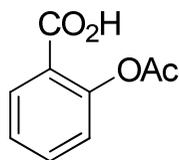
2.- Nombres "sin propietario"

Nombres comunes no patentables.

- Denominación Común Internacional (DCI, INN): es la denominación oficial de los fármacos, determina los principios activos y no los medicamentos ya terminados. Estos nombres son asignados por la Organización Mundial de la Salud (OMS). En España se usa el término DOE (denominación oficial española).
- Nombres químicos o sistemáticos: es un nombre formado de acuerdo con las reglas descritas en las diferentes secciones de la Nomenclatura de la Química Orgánica (IUPAC). Puede utilizarse una nomenclatura semisistemática que utiliza el nombre de un esqueleto básico o característico en la estructura molecular.

NOMENCLATURA

fármacos



Nombre sistemático	ácido 2-acetoxibenzoico
Nombre semisistemático	ácido acetilsalicílico
Nombre genérico	aspirina
Nombres comerciales	A.A.S. [®] Adiro [®] Aspirina [®] Solusprin [®]

NOMENCLATURA

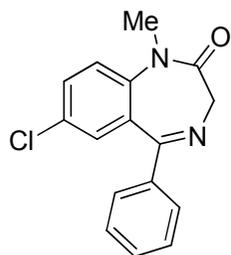
Sistema Anatómico-terapéutico-químico (código ATC)

<u>Grupo</u>	<u>Descripción</u>	
<i>A</i>	<i>Tracto alimentario y metabolismo</i>	En este sistema se asocia una letra a un grupo anatómico. Dentro de cada letra, de A-V, podemos encontrarnos una subdivisión según el grupo terapéutico indicado por dos dígitos. Éste a su vez se divide en subgrupos terapéuticos. Finalmente se indica el grupo químico al cual pertenece el fármaco.
<i>B</i>	<i>Sangre y órganos formadores</i>	
<i>C</i>	<i>Sistema cardiovascular</i>	
<i>D</i>	<i>Agentes dermatológicos</i>	
<i>G</i>	<i>Genito-urinario y hormonas sexuales</i>	
<i>H</i>	<i>Hormonas no sexuales</i>	
<i>J</i>	<i>Antiinfecciosos sistémicos</i>	
<i>L</i>	<i>Antineoplásicos y agentes inmunosupresores</i>	
<i>M</i>	<i>Sistema muscular y esqueleto</i>	
<i>N</i>	<i>Sistema Nervioso Central (SNC)</i>	
<i>P</i>	<i>Agentes antiparasitarios</i>	
<i>R</i>	<i>Sistema respiratorio</i>	
<i>S</i>	<i>Órganos sensoriales</i>	
<i>V</i>	<i>Varios</i>	

El código ATC lo proporciona el Centro Colaborador de la OMS para Metodologías en Medicamentos y Estadísticas (WHO Collaborating Centre for Drugs and Statistics Methodology) con sede en Oslo (Noruega).

NOMENCLATURA

Sistema Anatómico-terapéutico-químico



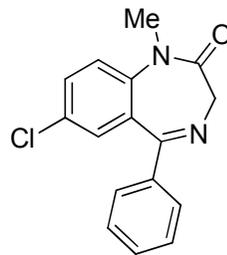
N	Ejerce su acción sobre el grupo anatómico SNC
N05	Pertenece al grupo terapéutico “Agentes Psicolépticos”
N05B	Pertenece al subgrupo terapéutico “Tranquilizantes”
N05B A	Pertenece al grupo químico derivados de diazepam
N05 B A01	Nombre específico diazepam

Ejemplos de Nomenclatura semisistemática

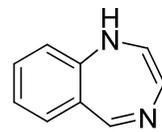
La complejidad estructural y estereoquímica de la mayor parte de los fármacos hace que se hayan adoptado métodos de nomenclatura semisistemática, fundamentados en el uso de nombres aceptados para una serie de estructuras base.

Éstos incluyen una numeración aceptada que, generalmente, no coincide con la que se aplicaría sistemáticamente.

Diacepam



7-cloro-1,3-dihidro-5-fenil-1-metil-1,4-benzodiazepin-2-ona

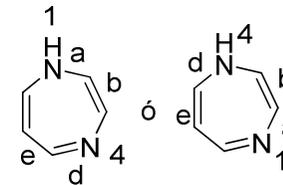


1,4-Benzo[e]diazepinas

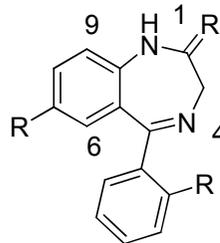


Benzo

equivalentes



1,4-Diazepina



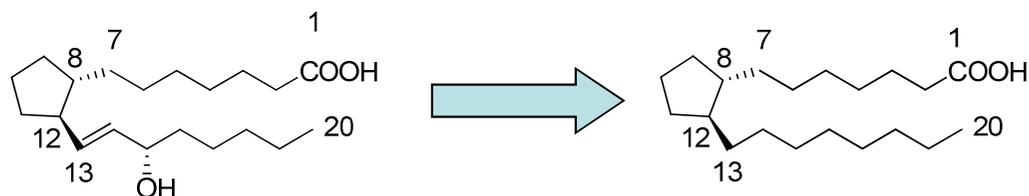
Estructura general de 1,4-benzodiazepinas

Ejemplos de Nomenclatura semisistemática

Prostaglandinas

Las prostaglandinas, en general, pueden nombrarse de forma abreviada utilizando conjuntos de letras y números.

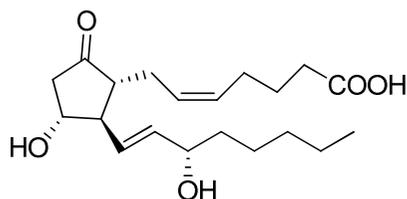
1. Las letras indican el tipo de sustitución del anillo de ciclopentano.
2. Los números, el número de dobles enlaces en las cadenas laterales.
3. Finalmente, la inclusión de letras griegas (α y β) permite indicar la estereoquímica del carbono 9.



Estructura general postaglandinas

ácido trans prostanoico

Ya incluye estereoquímica en los carbonos 8 y 12.



ácido (5Z,13E,15S,11 α)-11,15-dihidroxi-9-oxo-5,13-prostandienoico

Nombre Comercial: Cervidil, Prostin E2 y Propess

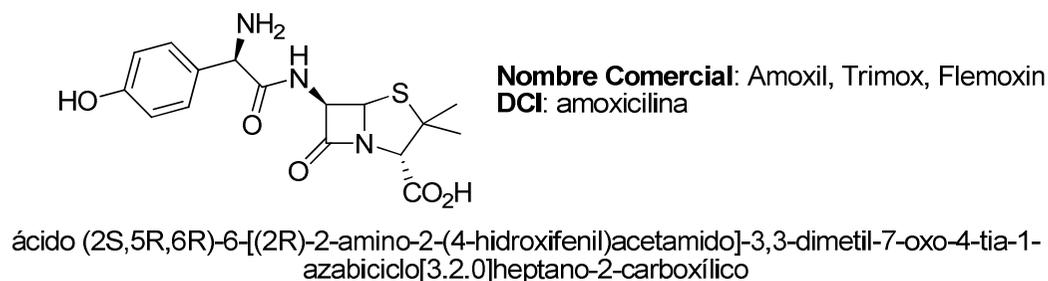
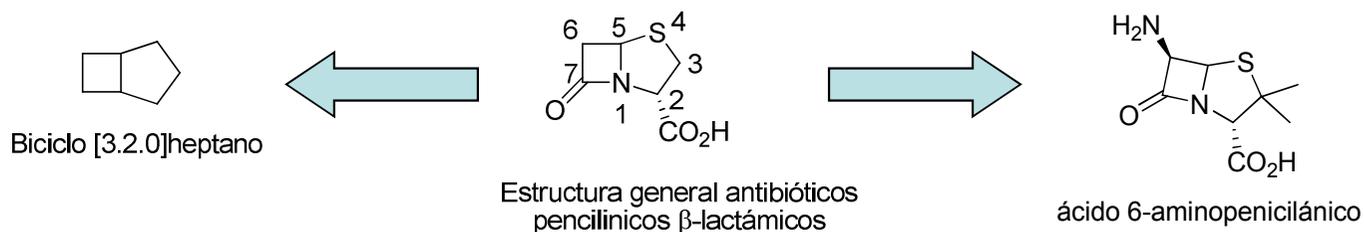
DCI: Dinoprostona
Prostaglandina E₂ α (PGE₂ α)

NOMENCLATURA

Ejemplos de Nomenclatura semisistemática

Antibióticos β -lactámicos

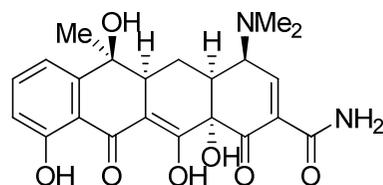
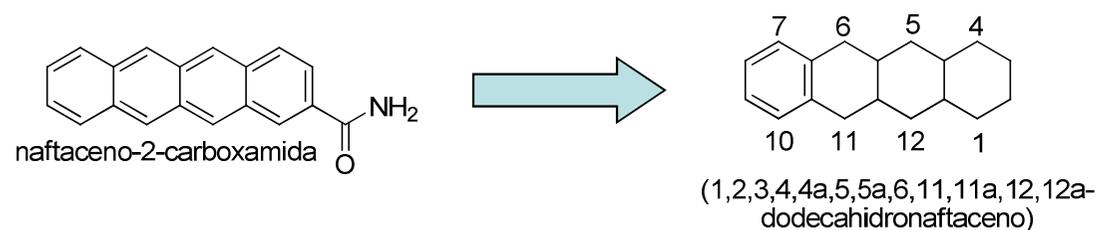
Los antibióticos β -lactámicos son el grupo más ampliamente usado entre los antibióticos disponibles, siendo los más comunes los derivados de penicilina. Su estructura química se caracteriza por la presencia de un anillo betalactámico y un anillo de tiazolidina, formando el ácido 6-aminopenicilánico



Ejemplos de Nomenclatura semisistemática

Tetraciclinas

Las tetraciclinas constituyen un grupo de antibióticos de origen bacteriano que abarca un amplio espectro en su actividad antimicrobiana. Químicamente son derivados de la naftacenocarboxamida policíclica, núcleo tetracíclico, de donde deriva el nombre del grupo.



Nombre Comercial: Tetralan, Somicina, Achromycin
DCI: Tetraciclina

(4*S*,4*aS*,5*aS*,6*S*,12*aS*)-4-(dimetilamino)-6,10,12,12*a*-tetrahidroxi-6-metil-1,11-dioxo-1,4,4*a*,5,5*a*,6,11,12*a*-octahidronaftaceno-2-carboxamida