

NOMENKLATURA A TERMINOLOGIE

Poznámky k některým důležitějším pravidlům nového návrhu nomenklatury sacharidů

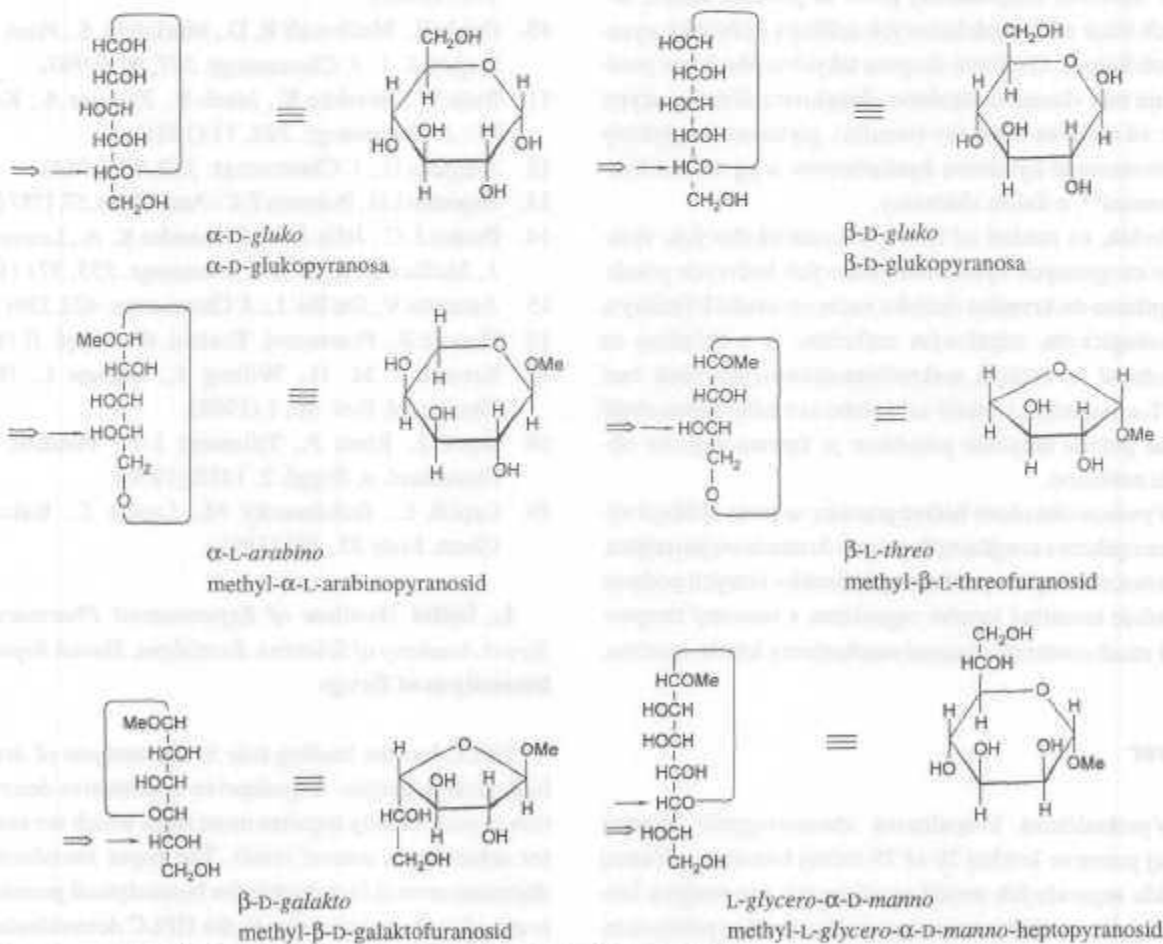
Nedávno vyšel delší dobu očekávaný, nově přepracovaný návrh nomenklatury sacharidů^{1,2}, vydaný nomenklaturní komisí IUPAC a IUBMB, který rozšiřuje a reviduje dříve vydaná pravidla³. Již z jeho devadesátistránkového rozsahu vyplývá, že nomenklatura sacharidů nemůže vystačit s obecnými pravidly organické chemie. Snaha trvat na nich bez výjimky by vytvořila nomenklaturu značně nepraktickou; přesto se autoři návrhu odchyľují od obecných pravidel IUPAC co nejméně, a jen účelně.

Významnou změnou v doposud platných pravidlech je zavedení nového pojmu *anomerní referenční atom*, k němuž se vztahuje použití anomerního konfiguračního sym-

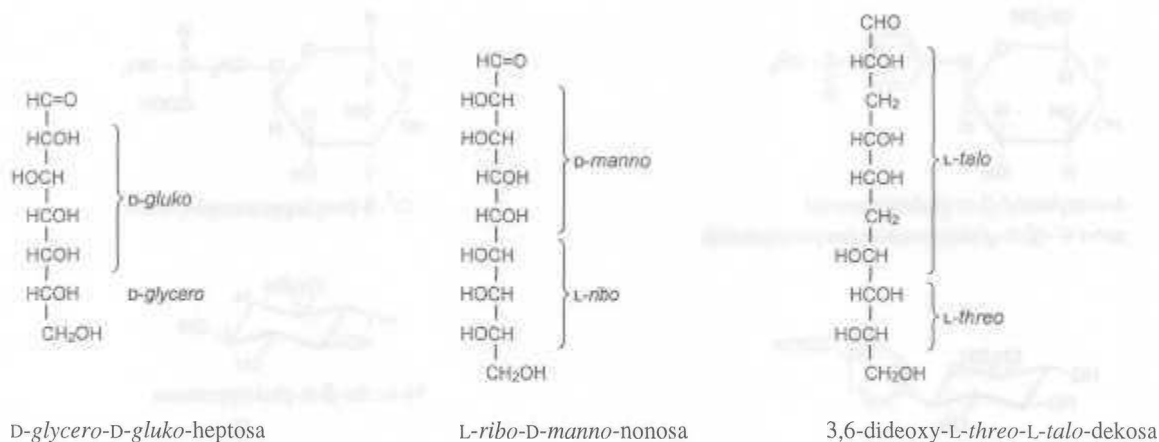
bolu α a β (pro pojmenovávání glykosidů). Doposud se totiž tyto anomerní konfigurační symboly odvozovaly výlučně od konfigurace *konfiguračního atomu*, pomocí něhož cukry rozdělujeme do dvou skupin, tj. D a L řady. Nyní se anomerní konfigurační symboly α a β přiřazují podle konfigurace *anomerního referenčního atomu*.

Připomeňme si, že konfigurační atom je chirální atom uhlíku s nejvyšším pořadovým číslem v cukerném řetězci, např. u tetros je to uhlík č. 3, u pentos uhlík č. 4, u hexos uhlík č. 5, atd. Je-li na tomto atomu uhlíku ve Fischerově projekci hydroxylová skupina (nebo potenciální hydroxylová skupina) orientována vpravo, pak je tato konfigurace D, je-li vlevo, je tato konfigurace L.

Anomerní referenční atom je atom uhlíku s nejvyšším pořadovým číslem v té skupině chirálních center, která



Obr. 1. \Rightarrow označuje konfigurační atom, \rightarrow označuje anomerní referenční atom



Obr. 2.

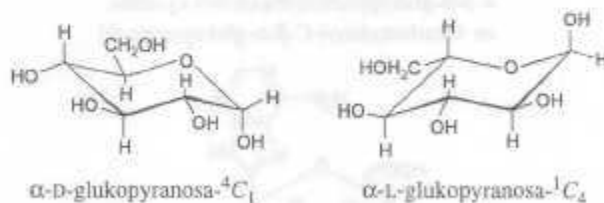
sousedí s anomerním centrem v heterocyklickém kruhu a je specifikována pouze jedinou *konfigurační předponou* (prefixem). Jestliže je ve Fischerově projekci konfigurace na anomerním centru shodná s konfigurací anomerního referenčního atomu, pak konfiguraci anomerního centra označujeme konfiguračním symbolem *a*, je-li rozdílná, pak symbolem *p*.

Z uvedených definic vyplývá, že pro tetrosy, pentosy a hexosy je anomerní referenční atom totožný s konfiguračním atomem, kdežto u cukrů s delším řetězcem, tj. heptos, oktos atd., nejsou oba atomy totožné (konfigurační atom má vždy vyšší číslo než referenční) (obr. 1).

Konfigurační předpony tvoří základ systematických názvů cukrů a popisují konfiguraci nejvýše 4 chirálních center. Proto názvy cukrů s větším počtem chirálních atomů uhlíku než 4 v řetězci se tvoří kombinací dvou nebo více konfiguračních předpon. Konfigurační předpony se řadí vždy tak, aby první z nich, která je nejbližší uhlíku C-1 a v které mají uhlíkové atomy nejnižší čísla, označovala 4 chirální centra a byla v těsné blízkosti kmene názvu. Zbývající chirální centra jsou spojována do jedné nebo několika konfiguračních předpon vždy s co největším počtem chirálních center (např. *D-erythro* a ne *D-glycero-D-glycero*). Konfigurační předpona nejvzdálenější od uhlíku C-1 se v řadě konfiguračních předpon uvádí jako první. Konfigurační předpony nemusí vždy zahrnovat nepřerušovaný sled chirálních center, čehož se využívá u názvů deoxycukrů (obr. 2).

Pro cyklické formy cukrů se používají názvy oxirosa (oxiranový kruh), oxetosa (oxetanový kruh), furanosa (oxolanový kruh), pyranosa (oxanový kruh), septanosa (oxepanový kruh) a dále názvy oktanosa, nonanosa (odvozené z odpovídajících alkanů přidáním přípony -osa).

Konformace pro furanosy se označují písmeny *E* (en-



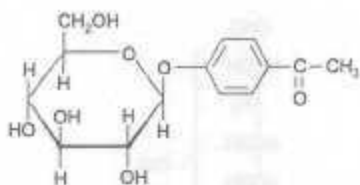
Obr. 3.

velope) a *T* (twist), pro pyranosy *C* (chair), *B* (boat), *S* (skew) a *H* (half chair). Čísla atomů uhlíku, které jsou nad odpovídající referenční rovinou proloženou čtyřmi atomy uhlíku určité konformace, se píše vlevo k symbolu konformace jako horní index, čísla atomů, které jsou pod touto rovinou se píše k témuž symbolu konformace jako dolní index. Je-li pod nebo nad rovinou proloženou čtyřmi atomy konformace jiný atom než uhlík, např. kyslík, píše se místo čísla index symbolu atomu, např. *O*, *S* aj. Konformační deskriptor se píše na konec názvu, např. α -*D*-glukopyranosa-⁴C₁ (obr. 3).

Předpony „anhydro“, „dehydro“, „deoxy“ a „thio“ jsou předpony odlučitelné, což znamená, že se řadí mezi další předpony podle abecedního pořadí, a nejsou tedy spojeny těsně s kmenovým jménem. Je to dáno již dlouho užívanou praxí v chemii sacharidů, avšak je to v rozporu s obecnými nomenklaturními pravidly IUPAC.

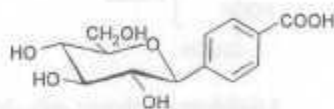
Glykosidy lze pojmenovat třemi způsoby. Pro glykosidy s jednoduchým aglykonem obvykle volíme nejčastěji používaný způsob: alkyl-(aryl)-glykosidy. Pro glykosidy se složitými aglykony je často výhodné vytvořit název *a*) pomocí zbytku „glykosyloxy-“, popřípadě *b*) pomocí zbytku „O-glykosyl-“. Anomerní konfigurační symboly α a β klademe vždy před konfigurační předponu, která je nejbližší kmenovému názvu (obr. 4).

V českém názvosloví, na rozdíl od anglického, se jméno aglykonu spojuje se jménem cukru spojovníkem. U složitěj-

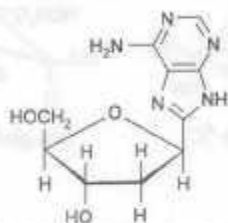


4-acetylfenyl- β -D-glukopyranosid
nebo 4'-(β -D-glukopyranosyloxy)acetofenon

Obr. 4.



4- β -D-glukopyranosylbenzoová kyselina
ne 4-karboxyfenyl-C- β -D-glukopyranosid



8-(2-deoxy- β -D-*erythro*-pentofuranosyl)adenin
ne adenin-8-(2-deoxyribosid)

Obr. 5.

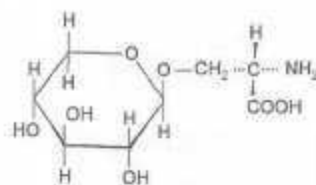
ších glykosidů se jméno aglykonu může dávat do závorek.

Za nesprávný se pokládá název *N*-glykosidy a *C*-glykosidy. *N*-Glykosidy jsou obecně glykosylaminy, *C*-glykosidy jsou glykosylalkany nebo glykosylareny a jejich deriváty (obr. 5).

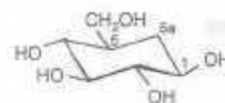
Deriváty cukrů, v nichž je atom kyslíku v kruhu cyklické formy (např. furanosa, pyranosa) nahrazen uhlíkem, jsou pojmenovávány jako karba analogy (obr. 6).

U ketos (ulos) se poloha karbonylové skupiny označuje numerickým prefixem umístěným mezi kmenovým názvem a jeho koncovkou, např. *D-arabino*-hex-2-ulos je systematický název pro *D*-fruktosu. Pro běžné ketosa jako je fruktosa a sorbosa se systematické názvy obvykle nepoužívají, dává se přednost názvům triviálním.

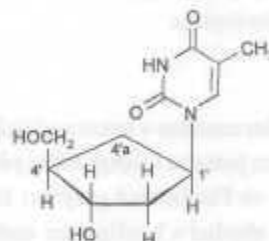
Pro označování anomerních vazeb neredukujících disacharidů se místo dosud používané jednoduché šipky používá dvojitá šipka \leftrightarrow a disacharid se pojmenovává jako glykosid, např.: β -D-fruktofuranosyl-(2 \leftrightarrow 1)- α -D-glukopyranosid (sacharosa). Redukující disacharidy se pojmenovávají jako glykosylglykosy, např. α -D-glukopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- α -D-glukopyranosa (α -maltosa, nikoli α -D-maltosa, neboť konfigurační symboly *D* a *L* se pro triviální názvy disacharidů nepoužívají).



O³- β -D-xylopyranosyl-L-serin



5a-karba- β -D-glukopyranosa



1-(2-deoxy-4a-karba- β -D-*erythro*-pentofuranosyl)thymin
nebo 4'a-karbatymidin

Obr. 6.

Nový návrh obsahuje také nomenklaturu polysacharidů. Systematické názvy homopolysacharidů se tvoří z názvu glykosa, glykopyranosa nebo glykofuranosa odtržením koncovky -osa a přidáním koncovky -an. Tak např. amylosa je (1 \rightarrow 4)- α -D-glukan, resp. přesněji (1 \rightarrow 4)- α -D-glukopyranan. Návosloví heteropolysacharidů a různým zkráceným způsobům zápisu jejich vzorců je věnována zvláštní pozornost.

Na závěr upozorňuji, že uvedené poznámky k nomenklatuře se týkají jen některých důležitých změn v pravidlech a jen základních strukturních typů sacharidů. Názvy nenasycených derivátů, deoxycukrů, thiocukrů, aminocukrů aj. je nutno vyhledat v příslušných paragrafech původního textu^{1,2}.

1. IUPAC and IUMB Nomenclature of Carbohydrates (Recommendations 1996) viz Pure Appl. Chem. 68, 1919(1996).
2. IUPAC and IUMB Nomenclature of Carbohydrates (Recommendations 1996) viz Carbohydr. Res. 297, 1 (1997).
3. Seznam všech dosud vydaných pravidel nomenklatury sacharidů, jejich derivátů a konjugátů je uveden v literatuře^{1,2}.

Miloslav Černý