

ROZDZIAŁ P-10 MACIERZYSTE STRUKTURY PRODUKTÓW NATURALNYCH I POKREWNYCH ZWIĄZKÓW

- P-100 Wprowadzenie
- P-101 Nomenklatura naturalnych produktów oparta na macierzystych wodorkach (alkaloidy, steroidy, terpeny, karoteniny, korynoidy, tetrapirole, i podobne związki)
- P-102 Nomenklatura węglowodanów
- P-103 Aminokwasy i peptydy
- P-104 Cyklitole
- P-105 Nukleozydy
- P-106 Nukleotydy
- P-107 Lipidy

P-100 WPROWADZENIE

Na polu produktów naturalnych wyróżnia się trzy poziomy. Nowemu związkowi, wyizolowanemu z naturalnego źródła, zazwyczaj nadaje się nazwę zwyczajową. Te nazwy zwyczajowe najczęściej odnoszą się do biologicznego pochodzenia substancji, chociaż często nie w sposób racjonalny ponieważ jeszcze niewiele wiadomo o wyodrębnionej strukturze. Takie nazwy traktuje się jako przejściowe, które w przyszłości będą zastąpione nazwami opisującymi szkielet, grupy charakterystyczne i podstawniki.

Kiedy będzie już znana pełna struktura, można będzie utworzyć nazwę systematyczną zgodnie z regułami opisanymi w rozdziałach P-1 do P-9 tych zaleceń. Jednak taka nazwa może być zbyt niewygodna do częstego wstawiania do tekstu publikacji. Trudność tę można pokonać wykazując ściśle podobieństwo do pokrewnych związków i tworząc nazwę 'semi-systematyczną'. W tym rozdziale nie tworzy się nazw preferowanych przez IUPAC (PIN). Wybór pomiędzy nazwami semi-systematyczną i systematyczną będzie efektem współdziałania IUPACu i IUMB Joint Commission on Biochemical Nomenclature i zostanie podany w przyszłych publikacjach.

Nazwy semi-systematyczne opierają się na określonych strukturach macierzystych o określonej konfiguracji, co może w przyszłości pomóc w pełnym opisanu struktury z użyciem reguł nomenklatury systematycznej. Istnieją dwa ogólne rodzaje semi-systematycznych struktur macierzystych używanych do tworzenia nazw produktów naturalnych i związków pokrewnych.

- (a) macierzyste wodorki, to jest struktury nie posiadające terminalnych heteroatomów ani grup funkcyjnych, czyli składające się tylko z atomów szkieletu i atomów wodoru, na przykład w nomenklaturze steroidów (odn. 16), terpenów, karotenów (odn. 40), korynoidów (odn. 45), tetrapiroli (odn. 17) lignanów i neolignanów (odn. 46) i alkaloidów. Ten typ semisystematycznych macierzystych wodorków jest analogiczny do związków macierzystych opisanych w P-2 i traktuje się je tak samo przy tworzeniu pełnych nazw;
- (b) związki o macierzystych funkcjach będące analogami związków o macierzystych funkcjach opisanych w P-34, czyli nomenklatur aminokwasów i peptydów (odn. 27), węglowodanów (odn. 26), cyklitol (odn. 39), nukleozydów i nukleotydów (odn. 47) i lipidów (odn. 8); mają grupy charakterystyczne zawarte w nazwach, które można modyfikować specyficznymi regułami używanymi w nomenklaturze systematycznej.

Podrozdział P-101 podaje reguły tworzenia nazw zwyczajowych i semi-systematycznych wodorków macierzystych oraz ich transformacji szkieletowych i funkcjonalizacji prowadzących do nazywania alkaloidów, steroidów, terpenów i niektórych pochodnych. Podrozdział P-102 podaje reguły nazywania węglowodanów, w P-103 opisano nomenklaturę aminokwasów i peptydów, w P-104 nomenklaturę cytolitoli, P-105 i P-106 opisują nukleozydy i nukleotydy a P-107 dyskutuje nomenklaturę lipidów. W razie napotkania trudności należy odwołać się do pełnych publikacji, jak opisano w każdym z podrozdziałów.

P-101 NOMENKLATURA PRODUKTÓW NATURALNYCH OPARTA NA MACIERZYSTYCH WODORKACH (ALKALOIDY, STEROIDY, TERPENY, KAROTENY, KORYNOIDY, TETRAPIROLE I PODOBNE ZWIĄZKI)

Rozdział ten opiera się na niedawnej publikacji ‘Revised Section F: Natural Products and Related Compounds, IUPAC Recommendations 1999’ i dodatkowym dokumencie ‘Corrections and Modifications 2004’ (lit. 9).

- P-101.1 Nazwy zwyczajowe związane z biologicznym pochodzeniem związku
- P-101.2 Semi-systematyczna nomenklatura produktów naturalnych (stereomacierzyste wodorki)
- P-101.3 Modyfikacje szkieletu struktur macierzystych
- P-101.4 Zamiana atomów szkieletu struktur macierzystych
- P-101.5 Addycja pierścieni i układów pierścieni
- P-101.6 Modyfikacja stopnia uwodornienia struktur macierzystych
- P-101.7 Pochodne struktur macierzystych
- P-101.8 Dalsze aspekty określania konfiguracji

P-101.1 NAZWY ZWYCZAJOWE ZWIĄZANE Z BIOLOGICZNYM POCHODZENIEM ZWIĄZKU

P-101.1.1 Dla związku wyizolowanego ze źródła naturalnego, dla którego potrzebna jest nazwa zwyczajowa, powinna ona być, jeśli to możliwe, oparta na nazwie rodziny, rodzaju lub gatunku materiału biologicznego, z którego został wyizolowany. Jeżeli związek występuje w wielu pokrewnych rodzinach nazwa klasy lub rzędu może również być podstawą jego nazwy.

P-101.1.2 Stosuje się końcówkę ‘un’ lub, z powodów brzmieniowych, ‘iun’, która wskazuje, że nazwa zwyczajowa oznacza związek o nieznannej strukturze.

P-101.2 NOMENKLATURA SEMI-SYSTEMATYCZNA PRODUKTÓW NATURALNYCH (stereomacierzyste wodorki)

- P-101.2.0 Wprowadzenie
- P-101.2.1 Ogólne reguły wyboru struktur macierzystych
- P-101.2.2 Cechy strukturalne, które muszą być uwzględniane przy wyborze struktur macierzystych
- P-101.2.3 Numeracja struktur macierzystych
- P-101.2.4 Identyfikacja poszczególnych pierścieni
- P-101.2.5 Łącznik atomowy, fragment końcowy i łącznik wiązaniowy

P-101.2.6 Stereochemiczna konfiguracja struktur macierzystych

P-101.2.7 Semisystematyczne nazwy rekomendowanych podstawowych struktur macierzystych

P-101.2.0 Wprowadzenie

Wiele występujących w naturze związków należy do dobrze zdefiniowanych klas strukturalnych, z których każdą charakteryzuje zestaw ściśle powiązanych struktur macierzystych, to znaczy że każdą z tych struktur można wyprowadzić z podstawowej struktury macierzystej przy pomocy jednej lub kilku zdefiniowanych operacji stosowanych w systematycznej nomenklaturze podstawnikowej (patrz P-13).

Ustalenie struktury nowego produktu naturalnego powinno skutkować zaprzestaniem stosowania nazwy zwyczajowej na rzecz nazwy systematycznej utworzonej zgodnie z regułami przedstawionymi dla systematycznej nomenklatury związków organicznych w rozdziałach od P-1 do P-9. Aby utworzyć pełną nazwę bardziej złożonych struktur można stosować istniejące nazwy semisystematyczne wymienione w P-101.2.7. Jeżeli dla nowego związku nie można znaleźć struktury macierzystej wśród dotąd określonych, można utworzyć nową strukturę macierzystą łącznie z numeracją. Procedura tworzenia i numerowania nowej struktury macierzystej jest opisana poniżej w kolejnych podrozdziałach.

P-101.2.1 Ogólne reguły wyboru struktury macierzystej

P-101.2.1.1 Podstawowa struktura macierzysta powinna odwzorowywać główny szkielet (zawierający nie końcowe heteroatomy i heterogrupy), wspólny dla większości związków danej klasy.

P-101.2.1.2 Podstawowa struktura macierzysta powinna być wybrana tak, aby struktury możliwie największej liczby produktów naturalnych mogły być z niej wyprowadzone przez dobrze określone operacje i reguły nomenklatury związków organicznych.

P-101.2.1.3 Podstawowa struktura macierzysta powinna zawierać możliwie najwięcej konfiguracji wspólnych dla danej klasy produktów naturalnych. Takie struktury macierzyste nazywa się stereomacierzystymi.

P-101.2.2 Strukturalne cechy uwzględniane przy wyborze struktur macierzystych

Przy tworzeniu nowych struktur macierzystych stosuje się reguły przedstawione poniżej.

Istniejące nazwy macierzystych struktur nie spełniające nowych reguł nazywa się nazwami zachowanymi (patrz Tabela 10.1).

P-101.2.2.1 Podstawowa struktura macierzysta może wyjątkowo zawierać pierścienie będące częścią grup charakterystycznych, takie jak na przykład lakton lub cykliczny acetal.

P-101.2.2.2 Podstawowa struktura macierzysta nie powinna zawierać terminalnych heteroatomów ani grup funkcyjnych (patrz P-101.2.1.1).

P-101.2.2.3 Podstawowa struktura macierzysta powinna zawierać acykliczne grupy alkilowe, występujące w większości związków danej klasy produktów naturalnych.

P-101.2.2.4 Podstawowa struktura macierzysta powinna być w pełni uwodorniona lub w pełni nienasycona w sensie posiadania maksymalnej liczby nieskumulowanych wiązań podwójnych (pierścienie mancude), ale nadal reprezentująca stopień nasycenia (lub nienasycenia) możliwie największej liczby pokrewnych związków.

P-101.2.2.5 Semi-systematyczne nazwy podstawowych struktur macierzystych powinny być wyprowadzone, na ile jest to możliwe, z nazw zwyczajowych utworzonych zgodnie z P-101. Końcówki zastosowane w miejsce ‘un’ lub ‘iun’ przypisuje się następująco:

- (a) ‘an’, jeżeli stereomacierzysty wodorek jest w pełni nasycony;
- (b) ‘en’ jeżeli część cykliczna lub główny łańcuch acyklicznej części zawiera maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych;
- (c) ‘aran’ w przypadku, kiedy w pełni nasycona struktura zawiera jeden lub więcej pierścieni z maksymalną liczbą nieskumulowanych wiązań podwójnych.

Istniejące nazwy struktur macierzystych, w których końcówki są inne od tych wskazanych powyżej np. morfinan i ibogamina są wyjątkami i należy je traktować jako nazwy zachowane.

P-101.2.2.6 Wskazany atom wodoru, jak opisano w P-14.7, P-52 i P-58.2, stosuje się do opisu izomerów podstawowych struktur macierzystych.

P-101.2.3 Numerowanie struktur macierzystych

P-101.2.3.1 System numerowania ustalony dla grupy strukturalnie pokrewnych produktów naturalnych jest przeniesiony na numerowanie atomów szkieletu podstawowej struktury macierzystej, z zachowaniem zasady, że wszystkie atomy szkieletu są objęte tą numeracją.

P-101.2.3.2 W przypadku braku systemu numerowania dla grupy strukturalnie pokrewnych produktów naturalnych podstawową strukturę macierzystą numeruje się zgodnie z przedstawionymi poniżej zasadami:

- (a) ustala się w szkielecie starszy pierścień lub układ pierścieni zgodnie z regułą P-44. Lokant ‘1’ przypisuje się atomowi starszego układu pierścieni, który miałby lokant ‘1’ zgodnie z systemem numerowania przyjętym dla tego konkretnego pierścienia lub układu pierścieni.
- (b) wszystkim atomom szkieletu starszego układu pierścieni przypisuje się kolejne cyfry arabskie, włączając atomy pozycji skondensowania w skondensowanym układzie pierścieni, rozpoczynając od lokantu ‘1’ i postępując zgodnie z kolejnością przypisaną temu konkretnemu pierścieniowi lub układowi pierścieni;
- (c) acyklicznym podstawnikom związanym z atomami szkieletu pierścienia lub łączącym acykliczne struktury, każdą w całości, zawierającą odgałęzienia, przypisuje się numery w porządku wzrastającej wartości lokantu atomów szkieletu, do których są przyłączone;
- (d) atomy szkieletu acyklicznych łączników z innym pierścieniem lub układami pierścieni, jeżeli są, numeruje się kolejno rozpoczynając od atomu bezpośrednio związanego ze starszym pierścieniem i następnie przez atomy szkieletu innych

pierścieni lub układów pierścieni jak opisano powyżej w (b); jeżeli występują dwa lub więcej acykliczne łączniki z innymi pierścieniami lub układami pierścieni, ten przyłączony do starszego pierścienia lub układu pierścieni w pozycji o najniższym lokancie numeruje się jako pierwszy, a kolejno pierścień przyłączony do niego, następnie acykliczny łącznik w pozycji o kolejnym najniższym lokancie starszego pierścienia lub układu pierścieni itd.;

- (e) spośród dwóch grup znajdujących się przy tym samym atomie szkieletu (w dwupodstawionej pozycji geminalnej) najpierw przypisuje się numery atomom grupy większej (zawierającej więcej atomów w szkielecie); jeżeli w dalszym ciągu istnieje wybór, to należy zastosować system alfanumeryczny (P-14.5). Jeżeli dwie grupy są identyczne i są przyłączone do stereomacierzystej struktury właściwie narysowanej (patrz Załącznik 3), pierwszą numerowaną jest grupa stereochemicznie α (zgodnie z P-101.2.6). W przypadku dwóch identycznych grup przyłączonych do acyklicznego terminalnego wiązania podwójnego, pierwszą numerowaną jest grupa 'trans' do głównego łańcucha, jak opisano we wskazaniach nomenklaturowych karotenoidów (reguła 12.4, lit. 40).

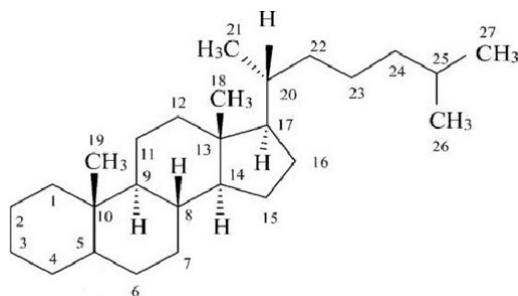
P-101.2.4 Identyfikacja poszczególnych pierścieni

Ponieważ lokanty stosuje się do opisu modyfikacji szkieletu, jak podano w P-101.3, nie zaleca się dalszego stosowanie używanego poprzednio oznaczenia pierścieni literami A, B, C itd., z wyjątkiem specjalnych przypadków np. usuwania końcowego pierścienia (patrz P-101.3.6). Tym niemniej, dla zachowania ciągłości systemu, nazwy z użyciem liter do oznaczania pierścieni, tam gdzie jest to stosowne, są nadawane ale nie są już zalecane.

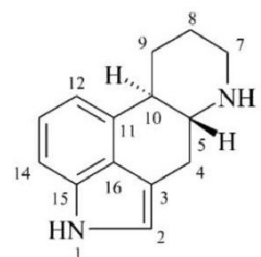
P-101.2.5 Łącznik atomowy, końcowy fragment i łącznik wiązaniowy

Do celów nomenklatury, podstawowe struktury macierzyste opisywane są przez specyficzne układy atomów lub grupy atomów nazywane: 'łącznikami atomowymi', 'fragmentami końcowymi' i 'łącznikami wiązaniowymi', które muszą być brane pod uwagę zgodnie z addytywnymi lub subtraktywnymi operacjami modyfikującymi podstawową strukturę macierzystą. Pod określeniem 'łącznik atomowy' rozumie się łańcuch homogenicznych (tego samego pierwiastka) atomów szkieletu łączący w każdej kombinacji przyczółki, atomy zwornikowe, pierścienie, układy pierścieni, podstawione atomy szkieletu w strukturze macierzystej lub heteroatomy. 'Kończącym fragmentem' struktury szkieletu jest acykliczny fragment homogenicznych atomów szkieletu, mający na jednym końcu cechy struktury kończących łączniki atomowe. Przez 'łączniki wiązaniowe' rozumie się połączenie pomiędzy różnymi kombinacjami przyczółków lub atomów zwornikowych, pierścieni, lub układów pierścieni, podstawionych atomów szkieletu, lub heteroatomów. Struktury przedstawione poniżej ilustrują łączniki atomowe, łączniki wiązaniowe i fragmenty końcowe. Zastosowanie tych terminów jest również prezentowane w P-101.3.1 w stosunku do usuwania atomów szkieletu określanych przedrostkiem 'nor'.

Przykłady:



cholestan



ergolina

łącznik atomowy:

w cholestanie: 1-4, 6-7, 11-12, 15-16 i 22-24

w ergolinie: 2, 4, 7-9, i 12-14

fragment końcowy:

w cholestanie: 18, 19, 21, 26 i 27

w ergolinie: brak

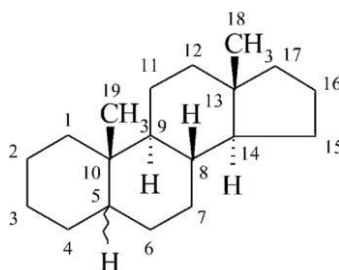
łączniki wiązaniowe:

w cholestanie: 5-10, 8-9, 8-14, 9-10, 13-14, 13-17 i 17-20

w ergolinie: 1-15, 3-16, 5-6, 5-10, 10-11, 11-16 i 15-16

P-101.2.6 Stereochemiczna konfiguracja struktur macierzystych

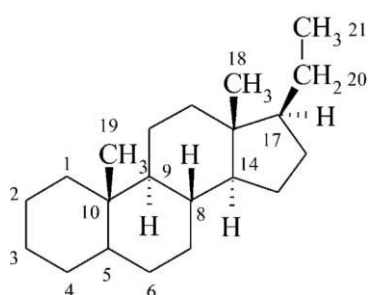
Nazwa podstawowej struktury macierzystej zazwyczaj zawiera konfiguracje absolutne wszystkich centrów chiralności i konfiguracje wiązań podwójnych, jeżeli występują, bez dalszych specyfikacji. Całkowita chiralność musi być zdefiniowana i tak np. stereochemię pozycji 'C-5' w steroidach, gdy to jest potrzebne, wskazuje się używając liter α , β i ξ . Atom lub grupa atomów znajdująca się poniżej płaszczyzny pierścienia lub planarnych i *quasi* planarnych układów pierścieni określana jest jako ' α ', natomiast atom lub grupę atomów powyżej tej płaszczyzny określa się jako ' β '. Stosowanie tej reguły wymaga orientacji struktur macierzystych jak podano w przykładach w załączniku 3. Wynikające z tej reguły konfiguracje, w przykładzie podanym poniżej, dla określonych atomów wodoru i grup metylowych w pozycjach 8, 10, 13 określone są jako ' β ', a w pozycjach 9 i 14 jako ' α '. Konfiguracja atomu wodoru w pozycji 5 jest nieznana i jego orientacja określona literą ξ (ksi), oznaczona jest na rysunku falującą kreską. Stereodeskryptory α , β i ξ stosowane do opisu domniemanej lub określonej konfiguracji umieszczają się bez nawiasu przed nazwą podstawowej struktury macierzystej. Symbole α , β są stosowane, jak określono powyżej i rozszerzone na określenie różnych aspektów modyfikacji strukturalnej podstawowych struktur macierzystych.



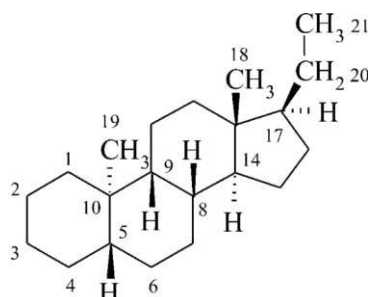
P-101.2.6.1 Konfiguracje różne od tych w strukturach macierzystych

P-101.2.6.1.1 System ' α , β ' stosuje się do określania konfiguracji centrów chiralności jak opisano powyżej lub zgodnie z rekomendacjami IUPAC – IUBMB dla nomenklatury steroidów (lit. 16). Każde centrum chiralności jest opisane stereodeskryptorem α , β lub ξ określającym konfigurację, które muszą być oznaczone i konfiguracje odwróconych. Symbole α , β lub ξ poprzedzone odpowiednimi lokantami umieszcza się na początku nazwy podstawowej struktury macierzystej. W przedstawionych poniżej przykładach konfiguracja przy C-5 musi być określona. Konfiguracje przy zwornikowych atomach węgla C-9 i C-10 w $5\beta,9\beta,10\alpha$ -pregnanie są odwrócone, kiedy porówna się je z konfiguracjami podstawowej struktury macierzystej. Ta metoda jest preferowana w stosunku do alternatywnej przedstawionej w P-101.2.6.1.2.

Przykłady:



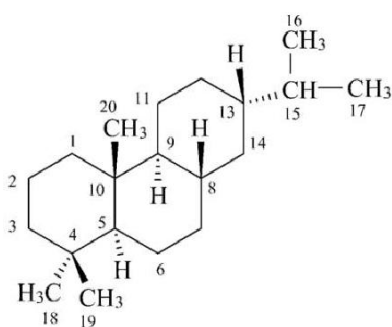
pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



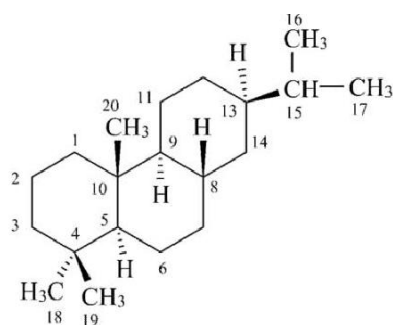
$5\beta,9\beta,10\alpha$ -pregnan

Zmianę konfiguracji nie zwornikowego bocznego łańcucha, który jest częścią struktury macierzystej, określa się metodą opracowaną dla C-17 steroidów (patrz 3S-5.2 lit. 16), w której α lub β informuje o położeniu względem płaszczyzny łańcucha bocznego, a nie atomu wodoru w tej samej pozycji.

Przykłady:



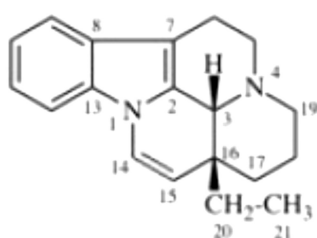
abietan
(podstawowa struktura macierzysta)



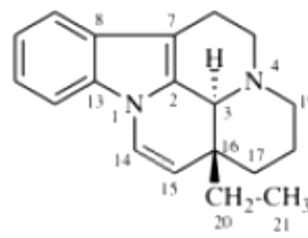
13β -abietan

P-101.2.6.1.2 Inwersję konfiguracji jednego ze stereogenicznych centrów, którego konfiguracja jest domniemana lub ustalona w nazwie podstawowej struktury macierzystej można wskazać pisany kursywą przedrostkiem '*epi*' (pochodzącym od 'epimer'). Przedrostek '*epi*' poprzedzony lokantem atomu o inwertowanej konfiguracji umieszcza się przed nazwą struktury macierzystej. 13β -Abietan opisany powyżej w P-101.2.6.1.1 można również nazwać $13\text{-}epi$ -abietanem.

Przykłady:



eburnamenina
(podstawowa struktura macierzysta)



3-*epi*-eburnamenina
3α-eburnamenina

P-101.2.6.1.3 Stereodeskryptory 'R' i 'S'.

Stereodeskryptory 'R' i 'S' stosuje się do opisu konfiguracji absolutnej nie określonej przez przedstawiony powyżej system 'α, β', zgodnie z regułą CIP (Cahna-Ingolda-Preloga) na podstawie pierwszeństwa podstawników i zgodnie z zasadami opisanymi w P-9. Stereodeskryptory 'R' i 'S' stosuje się również wtedy, kiedy w wyniku otwarcia pierścienia tworzą się dwa centra chiralności, z których jedno może się zmieniać jak opisano dla witaminy D w P-101.8.4.

P-101.2.7 Semi-systematyczne nazwy rekomendowanych struktur macierzystych są zamieszczone w Tabeli 10.1. Struktury tych połączeń są przedstawione w Załączniku 3.

Tabela 10.1 Nazwy podstawowych struktur stereomacierzystych (lista nie ograniczająca)

(a) alkaloidy

akonitan	ewonina	18-oksajohimban
ajmalan	formozanan	oksyakantan
akuammilan	galantamina	ormozanin
alstofilan	galantan	pankracyna
aporfina	hasubanan	readan
aspidofraktydyna	hetysan	rodiazyna
aspidospermidyna	ibogamin	samandaryn
atydane	johimban	sarpagan
atyzyna	konanina	senecionan
berbaman	kopsan	solanidan
berbin	korynan	sparteina
cefalotaksyna	korynoksan	spirosolan
cewan	krynan	strychnidyna
chelidonina	kuran	tazetyna
cynchonan	likopodan	tropan
dafnan	likorenan	tubokuran
dendroban	litran	tubulozan
eburnamenina	litranidyna	weratraman
emetan	lunaryn	winkaleukoblastyna
ergolina	matrydyna	winkan
ergotaman	morfina	wobazan
erytrynan	nufarydyna	wobtuzyn
ewonimina		

(b) steroidy

androstan	estran	kardanolid
bufanolid	furostan	poriferastan
cholan	gonan	pregnan
cholestan	gorgostan	spirostan
ergostan	kampestan	stigmastan

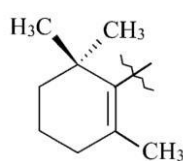
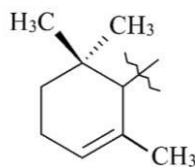
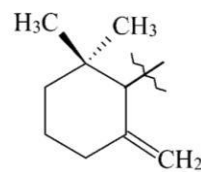
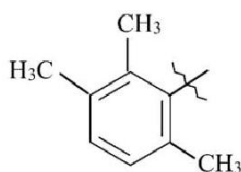
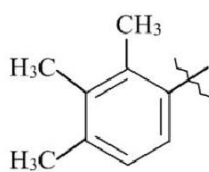
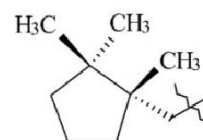
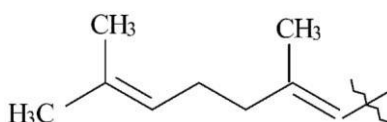
(c) terpeny (z wyjątkiem retinalu wszystkie są macierzystymi wodorkami)

abietan	grajanotoksan	mentan (<i>p</i> -izomer)
ambrozan	gwajan	ofiobolan
arystolan	himachalan	oleanan
atyzan	hopan	pikrazan
bejeran	humulan	pimaran
bisabolan	kadynan	pinan
bornan	karan	podokarpan
cedran	kariofilan	protostan
dammaran	β,ϕ -karoten *	retynal
dryman	β,ψ -karoten *	rozan
eremofilan	ϵ,κ -karoten *	taksan
eudesman	ϵ,χ -karoten *	trichotekan
fenchan	kauran	tujan
gammaceran	labdan	ursan
germakran	lanostan	
gibban	lupan	

(d) inne (wszystkie to macierzyste wodorki poza cefamem i penamem)

21 <i>H</i> -bilin	neoflawan
cefam	neolignan
flawan	penam
izoflawan	porfiryń
koryn	prostan
lignan	tromboksen

* Przykłady czterech różnych karotenów; możliwych jest 28 macierzystych struktur karotenu, pochodnych wszystkich permutacji siedmiu grup końcowych przedstawionych poniżej:

 β (beta) ε (epsilon) γ (gamma) ϕ (phi) χ (chi) κ (kappa) ψ (psi)**P-101.3 MODYFIKACJE SZKIELETU STRUKTUR MACIERZYSTYCH****P-101.3.0 Wprowadzenie**

- P-101.3.1 Usuwanie atomów szkieletu
- P-101.3.2 Addycja atomów szkieletu
- P-101.3.3 Tworzenie wiązania
- P-101.3.4 Rozerwanie wiązania
- P-101.3.5 Migracja wiązania
- P-101.3.6 Usuwanie końcowego pierścienia
- P-101.3.7 Łączenie przedrostków 'cyklo', 'seko', 'apo', 'homo' i 'nor'

P-101.3.0 Wprowadzenie

Szkielet struktur macierzystych może być modyfikowany na wiele sposobów, może być zwiększany, zmniejszany lub przegrupowywany w wyniku różnych operacji strukturalnych opisanych w P-13. Operacje te są odzwierciedlane w nazwach przez przedrostki, rozłączne i nierozłączne, dodawane do nazw struktur macierzystych. Zmiany dotyczące konfiguracji muszą być również wprowadzone, tak jak wskazano w P-101.2.6. W nomenklaturze produktów naturalnych liczba operacji nie jest limitowana.

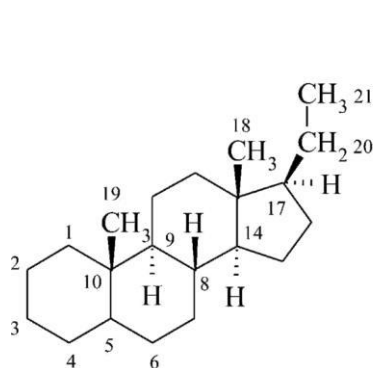
Ten rozdział zastępuje reguły Części F (lit. 9) i reguły A-71 do A-75 odnoszące się do węglowodorów terpenowych przedstawionych w zaleceniach z 1979 roku (lit. 1).

P-101.3.1 Usuwanie atomów szkieletu bez zmiany liczby pierścieni

P-101.3.1.1 Usunięcie niepodstawionego nasyconego lub nienasyconego atomu ze szkieletu pierścienia lub niepodstawionego atomu z nasyconego acyklicznego fragmentu podstawowej struktury macierzystej wraz z przyłączonymi do niego atomami wodoru wskazuje nierozdzielny przedrostek 'nor'. Utratę dwóch lub więcej atomów szkieletu wskazują zwykle przedrostki zwielokrotniające 'di', 'tri' itd. dodane do przedrostka 'nor'.

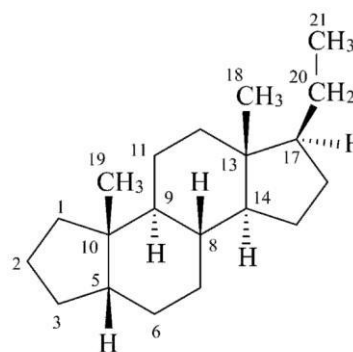
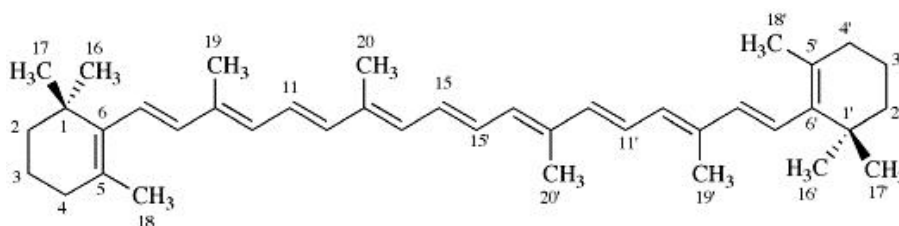
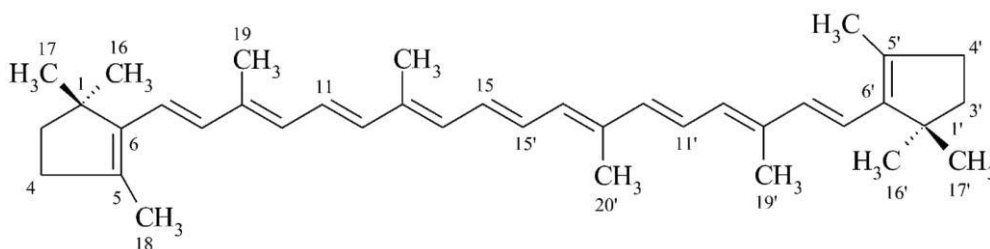
Pozycja usuniętego atomu jest oznaczona we wszystkich przypadkach przez podanie jego lokantu w ponumerowanej podstawowej strukturze macierzystej. Jakkolwiek podaje się lokant każdego usuniętego atomu szkieletu i jednoznaczną nazwę można utworzyć przez usunięcie dowolnego atomu szkieletu, atomu węgla lub heteroatomu, to zwyczajowo z łącznika atomowego w cyklicznej części szkieletu struktury usuwa się atomy z możliwie najwyższym lokantem. W karotenoidach, jako wyjątek, lokant przypisany do 'nor' jest najniższym z możliwych (patrz Nomenklatura Karotenoidów, reguła 5.1, lit. 40).

Przykłady:



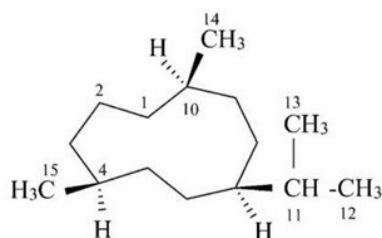
pregnan

(podstawowa struktura macierzysta)

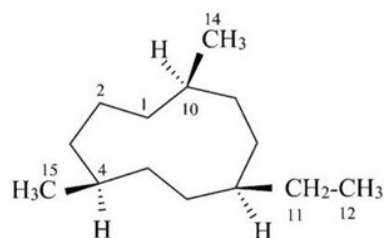
4-nor-5 β -pregnan β,β -karoten (podstawowa struktura macierzysta)2,2'-dinor- β,β -karoten

W acyklicznej części struktury szkieletu usuwanym atomem jest ten z acyklicznego łącznika atomowego lub końcowego fragmentu, który jest najbliższy wolnego końca części acyklicznej (tak aby utrzymać, jak tylko to jest możliwe, zbieżne numeracje związku wyjściowego i uzyskanego w wyniku operacji strukturalnej).

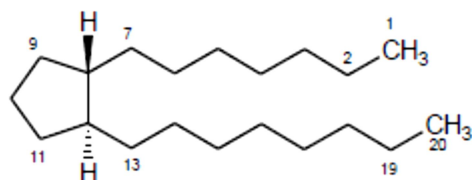
Przykłady:



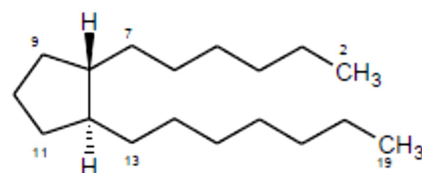
germakran
(podstawowa struktura macierzysta)



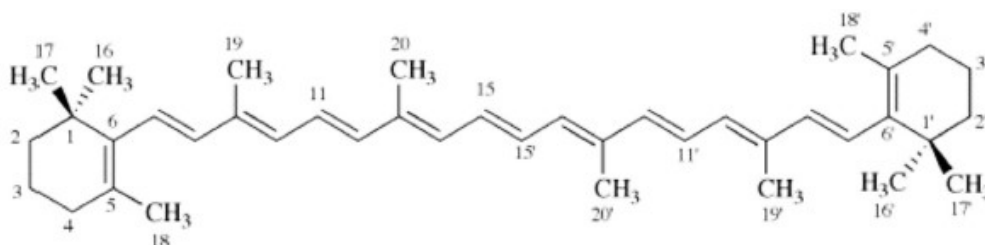
13-norgermakran
(1*R*,4*S*,7*S*)-4-etylo-1,7-dimetylocykłodekan
(pozycja 1 jest pozycją 10 dla germakranu)



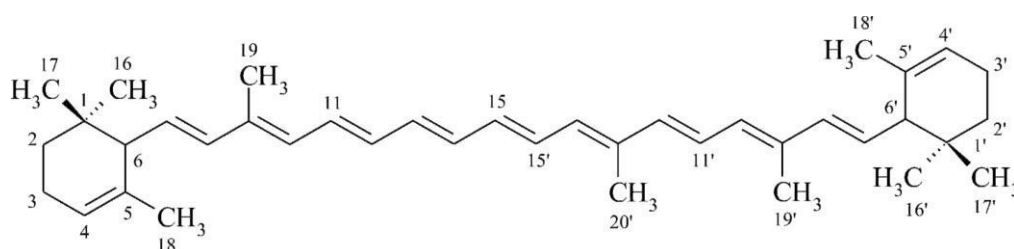
prostan
(podstawowa struktura macierzysta)



1,20-dinorprostan
(1*S*,2*S*)-1-heptylo-2-heksylocyklopentan



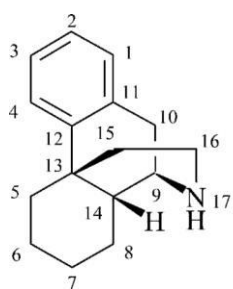
ε,ε-karoten
(podstawowa struktura macierzysta)



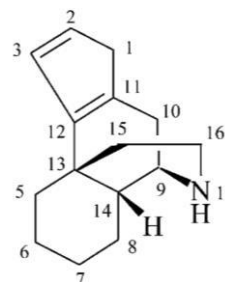
20-nor-ε,ε-karoten
(stosowanie nieprimowanych i primowanych lokantów patrz P-14.3.5)

P-101.3.1.2 Usunięcie nienasyconego atomu szkieletu z pierścienia zawierającego maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych w podstawowej strukturze macierzystej skutkuje utworzeniem nasyconej pozycji w pierścieniu, którą opisuje wskazany atom wodoru (patrz P-14.7). W nazwach symbol *H* (pisany kursywą) poprzedzony właściwym lokantem podaje się na początku nazwy zmodyfikowanej struktury jako nierozłączny przedrostek.

Przykład:



morfinan



1*H*-4-normorfinan

(podstawowa struktura macierzysta)

P-101.3.2 Addycja atomu szkieletu bez wpływu na liczbę pierścieni

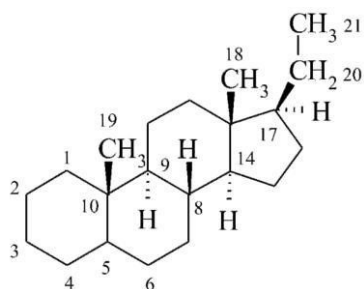
P-101.3.2.1 Addycję grupy metylenowej ($-\text{CH}_2-$) pomiędzy dwa atomy szkieletu podstawowej struktury macierzystej opisuje nierozłączny przedrostek ‘homo’; addycję dwóch lub więcej grup metylenowych wskazują przedrostki wielokrotniające ‘di’, ‘tri’ itd. Pozycje wprowadzonych grup metylenowych w zmodyfikowanej podstawowej strukturze macierzystej wskazuje się lokantami umieszczonymi przed przedrostkiem ‘homo’ i poprzedzonymi przedrostkiem wielokrotniającym, jeżeli to jest konieczne. Przypisanie lokantów dodanym grupom metylenowym zależy od tego czy jest ona włączona do atomowego łącznika, czy do końcowego acyklicznego fragmentu, czy też w łącznika wiązaniowego.

P-101.3.2.2 Numerowanie dodatkowych atomów szkieletu

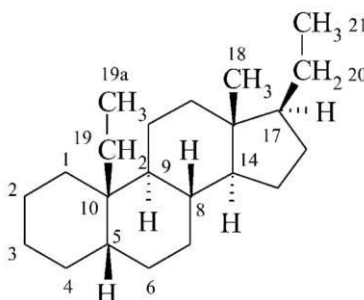
P-101.3.2.2.1 Grupy metylenowe włączone w łącznik atomowy lub końcowy fragment struktury oznacza się dodając litery ‘a’, ‘b’ itd. do lokantu atomu szkieletu o najwyższym numerze, będącego łącznikiem atomowym lub końcowym fragmentem zgodnie z położeniem wiązań podwójnych pozostających w strukturze. Jeżeli są dwa równoważne łączniki atomowe wybiera się najwyższy atomowy łącznik i grupa metylenowa jest wprowadzana po atomie szkieletu z najwyższym lokantem w tym łączniku.

Dodanie acyklicznych bocznych łańcuchów lub rozszerzenie końcowego fragmentu bocznego łańcucha już przyłączonego do stereomacierzystego wodoru może być także oznaczone zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej. Dodawane podstawniki są numerowane, jak opisano powyżej, dla ‘homo’ atomów.

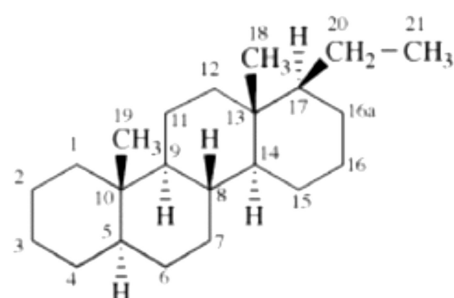
Przykłady:



pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



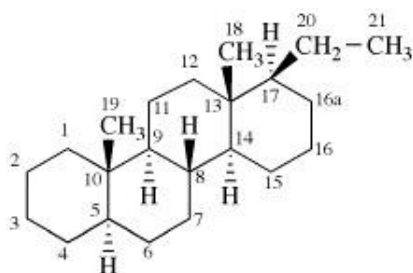
19a-homo-5β-pregnan
(nie 19-metylo-5β-pregnan; wydłużenie
bocznego łańcucha jest niedozwolone)



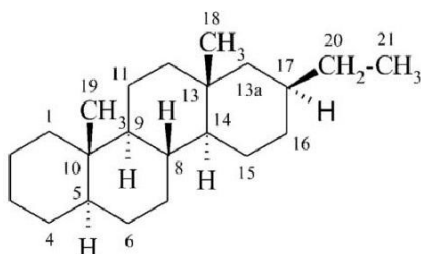
16a-homo-5α-pregnan

P-101.3.2.2.2 Grupy metylenowe włączone w łącznik wiązaniowy oznacza się wymieniając lokanty obu atomów szkieletu tworzących to wiązanie zamykając drugi (wyższy) numer w nawiasie, z literami 'a,b' itd. (poza nawiasem) zgodnie z liczbą grup metylenowych.

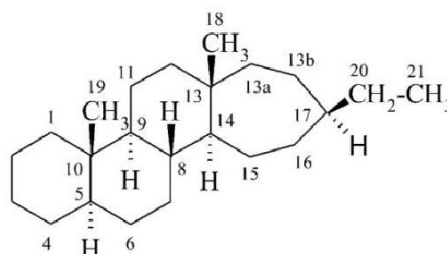
Przykłady:



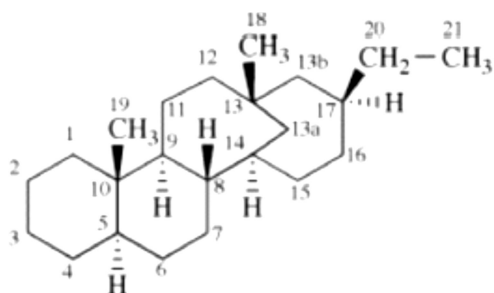
pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



13(17)a-homo-5α-pregnan

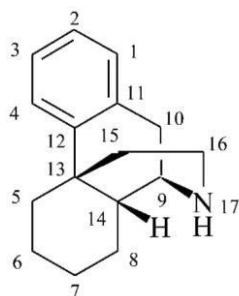


13(17)a,13(17)b-dihomo-5α-pregnan
[nazywany D(17a,17b)dihomo-5α-
pregnan; patrz reguła 2S-7.3, lit. 16]

13(14)a,13(17)b-dihomo-5 α -pregnan

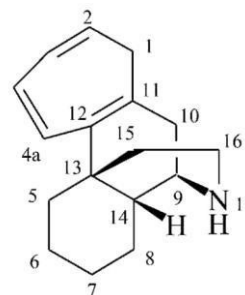
P-101.3.2.2.3 Wprowadzenie grupy metylenowej do pierścienia lub układu pierścieni (zawierających maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych) lub do układu sprzężonych wiązań podwójnych, może utworzyć pozycję nasyconą w pierścieniu, którą opisuje się wskazanym atomem wodoru (patrz P-14.7 i P-58.2). Miejsce grupy metylenowej jest określone przez regułę P-101.3.2.2 nawet wtedy, gdy pozycja nasycona znajduje się gdziekolwiek w układzie nienasyconego pierścienia. Określona jest ona lokantem wskazanego atomu wodoru. To jest zmiana dla nazw homoporfiryn (patrz lit. 17, reguła TP-5.1). Dwie tautomeryczne formy (A) i (B) przedstawione poniżej, są właściwie ponumerowane i nazwane.

Przykłady:

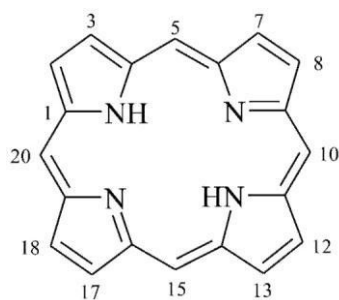


morfinan

(podstawowa struktura macierzysta)

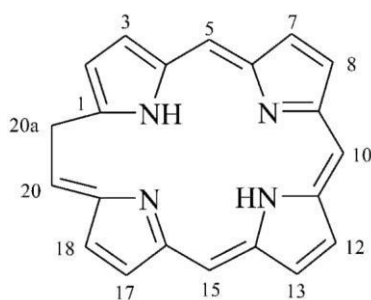


1H-4a-homomorphinan

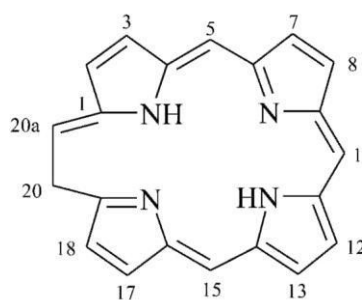


porfiryra

(podstawowa struktura macierzysta)



(A) 20aH-20a-homoporfiryra



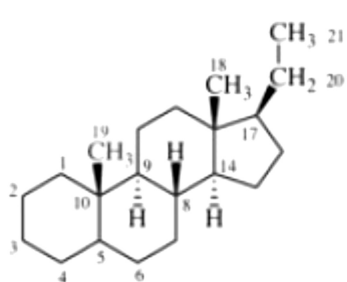
(B) 20H-20a-homoporfiryra

P-101.3.3 Tworzenie wiązań

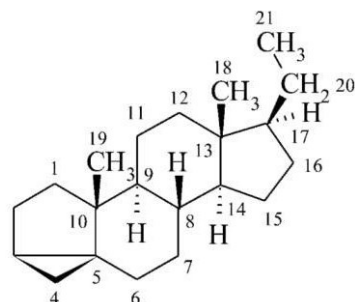
Tworzenie dodatkowego pierścienia w wyniku operacji łączenia (patrz P-13.5.3), w sensie tworzenia bezpośredniego wiązania między dwoma jakimikolwiek atomami struktury macierzystej opisuje się nierozłącznym przedrostkiem ‘cyklo’ (pisanym normalnie) poprzedzonym lokantami połączonych atomów. Kiedy potrzeba, konfigurację centrum chiralności utworzonego przez nowe wiązanie opisuje się deskryptorami α , β i ξ zgodnie z P-1-1.2.6, lub metodą CIP (*R*, *S*) zgodnie z P-101.2.6.1.3.

Konfiguracje podstawowej struktury macierzystej pozostają bez zmian. Nowe konfiguracje atomów pierścienia posiadających jeden atom wodoru, dalej obecny, określa się deskryptorami α lub β jak opisano w P-101.2.6 lub, jeżeli to konieczne, metodę sekwencji (*R*, *S*). Położenie atomu wodoru poniżej (α) lub powyżej (β) płaszczyzny układów pierścieni wskazuje właściwy symbol i duża litera *H* (pisana kursywą) poprzedzona lokantem atomu w strukturze pierścienia, wszystko zamknięte w nawiasie i podane przed odpowiednim przedrostkiem, w tym przypadku ‘cyklo’ (przedrostek ‘abeo’ patrz P-101.3.5.1). Metoda przedstawiona powyżej różni się od tej stosowanej w nomenklaturze steroidów (reguła 3S-7.5, lit. 16).

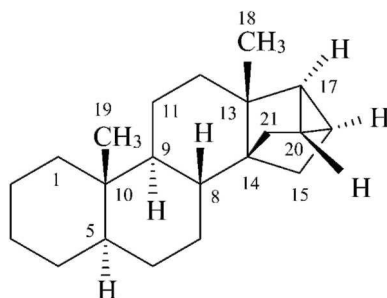
Przykłady:



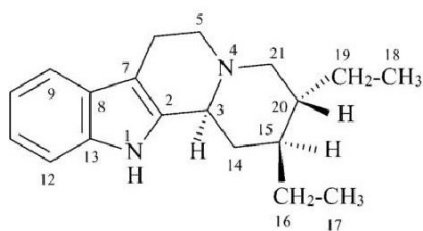
pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



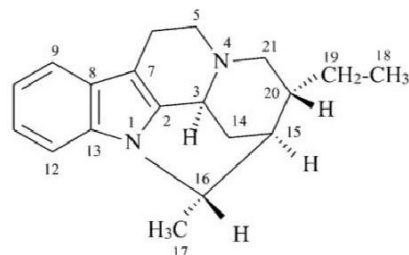
3 α ,5-cyklo-5 α -pregnan



(20*S*)-14,21:16 β ,20-dicyklo-5 α ,14 β -pregnan



korynan
(podstawowa struktura macierzysta)

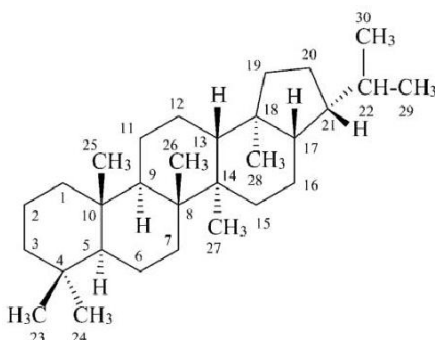


(16βH)-1,16-cyklokorynan

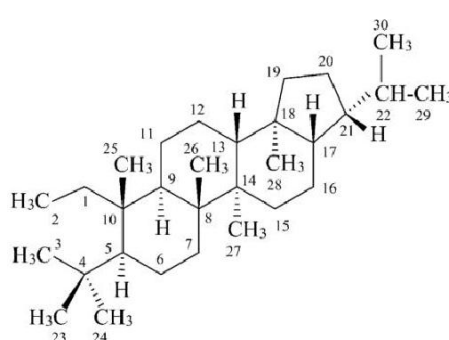
P-101.3.4 Rozerwanie wiązania

P-101.3.4.1 Rozerwanie wiązania pierścienia (nasyconego lub nienasyconego) z dodaniem odpowiedniej liczby atomów wodoru do każdej utworzonej nowej grupy końcowej wskazuje się nierozłącznym przedrostkiem 'seko' (nie kursywą) i lokantami rozerwanego wiązania. Zachowane jest numerowanie wyjściowej struktury.

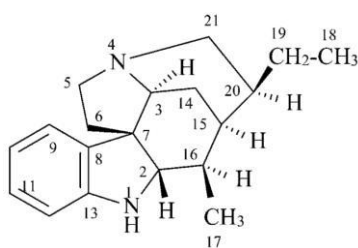
Przykłady:



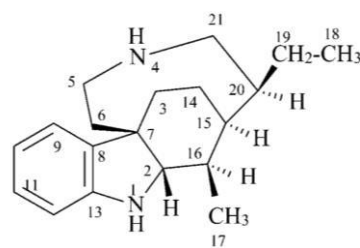
hopan
(podstawowa struktura macierzysta)



2,3-sekohopan



kuran
(podstawowa struktura macierzysta)



3,4-sekokuran

P-101.3.4.2 Przedrostek 'apo'

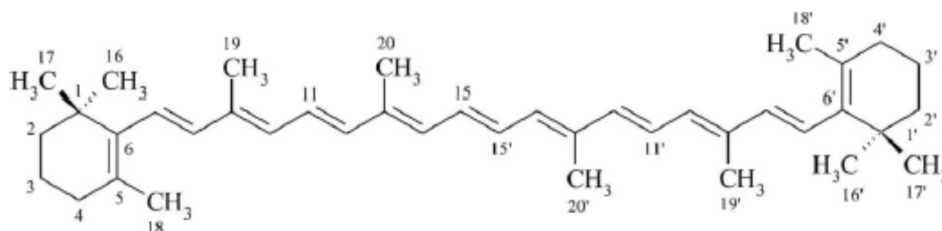
Przedrostek 'apo' pisany normalną czcionką, poprzedzony lokantem, stosuje się do wskazania usunięcia całego bocznego łańcucha z podstawowej struktury macierzystej od atomu szkieletu o wskazanym lokancie. Usunięcie dwóch lub więcej bocznych łańcuchów wskazuje się

przedrostkami ‘diapo’, ‘triapo’ itd. poprzedzonymi właściwymi lokantami. W powstałym po odłączeniu grup fragmencie zachowana jest numeracja atomów szkieletu podstawowej struktury macierzystej.

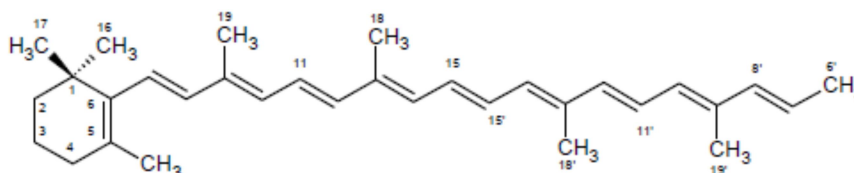
W nomenklaturze karotenoidów do opisu tej operacji stosowane jest następujące postępowanie (patrz lit. 40, reguła 10, Karotenoidy). Pisany normalną czcionką przedrostek ‘apo’, poprzedzony lokantem, jest stosowany do wskazania, że cały fragment cząsteczki poza atomem węgla o wskazanym lokancie został zastąpiony atomami wodoru. Grupa metylowa bocznego łańcucha nie jest traktowana jako leżąca ‘poza’ atomem węgla, do którego jest przyłączona. Usunięcie fragmentów z obu końców cząsteczki karotenoidów wskazuje się numerycznym przedrostkiem zwielokrotniającym ‘di’ poprzedzonym dwoma lokantami. Numeracja atomów szkieletu otrzymanego fragmentu struktury macierzystej pozostaje niezmienną.

Przedrostek i jego lokant bezpośrednio poprzedzają nazwę macierzystą dopóki lokant związany z przedrostkiem ‘apo’ nie jest większy niż 5. Jeżeli jest większy, to nie jest konieczne podawanie greckich liter określających końcowe grupy cząsteczki.

Przykład:



β,β -karoten
(podstawowa struktura macierzysta)



6'-apo- β -karoten
(zastosowanie nieprimowanych i primowanych lokantów patrz P-14.3.4)

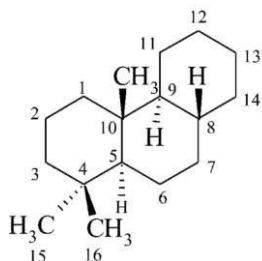
P-101.3.5 Migracja wiązań

Struktury macierzyste nie będące prostymi pochodnymi zaakceptowanych podstawowych struktur macierzystych, lecz mogące być rozważane jako wywodzące się ze struktur macierzystych w wyniku migracji jednego lub więcej wiązań, można nazywać w następujący sposób.

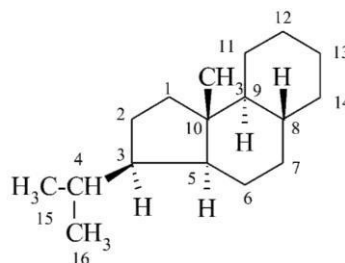
P-101.3.5.1 Nerozłączny przedrostek ‘x(y→z)-abeo’ wskazuje migrację od jednego końca pojedynczego wiązania z jego wyjściowej pozycji w podstawowej strukturze macierzystej do innej pozycji. W przedrostku, ‘x’ oznacza lokant stacjonarnego, to jest nie wędrującego końca migrującego wiązania; ‘y’ jest lokantem pozycji wędrującego końca wiązania w macierzystej (wyjściowej) strukturze, a ‘z’ jest lokantem pozycji wędrującego końca wiązania w otrzymanej, nowej strukturze. Numeracja początkowej podstawowej struktury macierzystej jest zachowana.

Poprzednio przedrostek ‘abeo’ był pisany kursywą (reguła F-4.8, literatura 1; reguła R-1.2.7.1, literatura 2). Dla spójności z innymi modyfikującymi strukturę przedrostkami obecnie zalecane jest pisanie go normalną rzymską czcionką. Nomenklatura ‘abeo’ opisana w tej regule jest wygodna do stosowania w dyskusji nad mechanizmami reakcji i biogenezie.

Przykład:



podokarpan
(podstawowa struktura macierzysta)



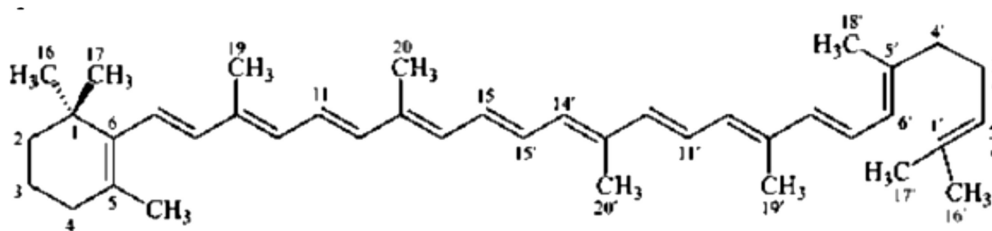
(3 α H)-5(4→3)-abeopodokarpan
3,5-cyklo-4,5-seko-3 β -podokarpan

P-101.3.5.2 Pisany kursywą przedrostek ‘*retro*’ poprzedzony parą lokantów jest stosowany do wskazania przesunięcia o jedną pozycję wszystkich pojedynczych i podwójnych wiązań w sprzężonym polienowym układzie ograniczonym parą lokantów; sprzężony polienowy układ wiązań nie może być częścią układu z maksymalną liczbą nieskumulowanych podwójnych wiązań w pierścieniu lub układzie pierścieni.

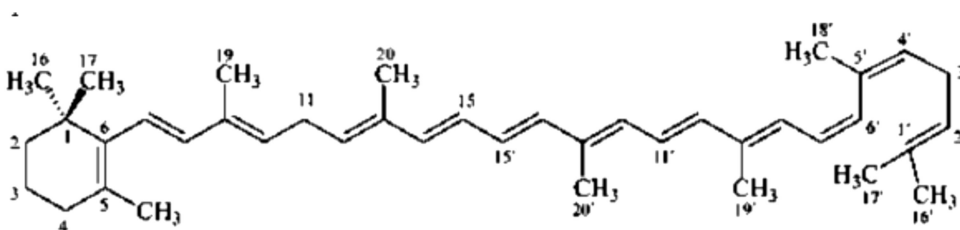
Pierwszym lokantem jest oznaczony atom szkieletu, który utracił atom wodoru, a drugim lokantem atom, który uzyskał atom wodoru.

Przedrostek ‘*retro*’ stosuje się w ten sposób tylko w nomenklaturze karotenoidów (patrz Karotenoidy reguła 9, lit. 9).

Przykład:



β,ψ -karoten
(podstawowa struktura macierzysta)

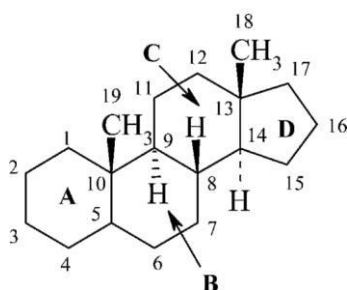


4',11-*retro*- β,ψ -karoten
(patrz P-16.9 dla zastosowanie nieprimowanych i primowanych lokantów)

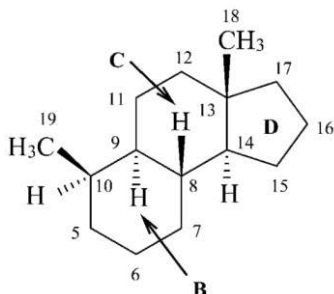
P-101.3.6 Usuwanie końcowego pierścienia

Usunięcie końcowego pierścienia ze struktury macierzystej i dodanie właściwej liczby atomów wodoru przy każdym połączeniu z sąsiednim pierścieniem wskazuje się nierozłącznym przedrostkiem ‘des’, który poprzedza duża litera oznaczającą usuwany pierścień (stosowanie przedrostka ‘des’ w nomenklaturze peptydów patrz P-103.3.5.4). Jest to jedyny przypadek w nomenklaturze, kiedy duże litery są w dalszym ciągu stosowane do identyfikacji pierścieni w strukturach macierzystych. Stereochemia wynikająca z nazwy stereomacierzystej struktury pozostaje niezmienną, chyba, że jest określona w inny sposób. W zmodyfikowanej strukturze zachowana jest numeracja atomów szkieletu struktury macierzystej. Stosowanie przedrostka ‘des’ jest zastrzeżone dla steroidów.

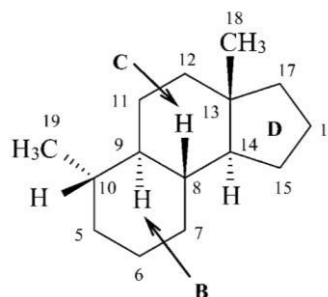
Przykład:



androstan
(podstawowa struktura macierzysta)



des-A-androstan



des-A-10 α -androstan

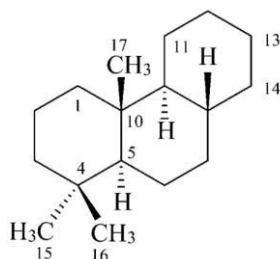
P-101.3.7 Łączenie przedrostków ‘cyklo’, ‘seko’, ‘apo’, ‘homo’ i ‘nor’

Modyfikacje podstawowych struktur macierzystych opisane przedrostkami w przedstawionych poprzednio wskazaniach (P-101.3.1 do P-101.3.4) można być łączyć aby opisać bardziej złożone zmiany w strukturze. Operacja strukturalna wskazana przez każdy przedrostek, ‘cyklo’, ‘seko’, ‘apo’, i ‘nor’, jest stosowana w stosunku do podstawowej struktury macierzystej sekwencyjnie, posuwając się ‘naprzód do tyłu’, to znaczy poruszać się od strony prawej do lewej, od nazwy podstawowej struktury macierzystej.

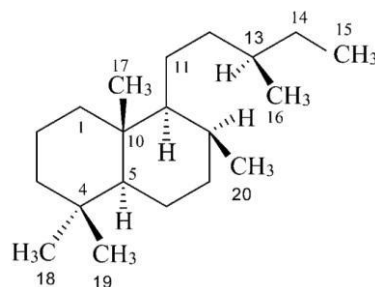
P-101.3.7.1 W przypadku kiedy różne kombinacje przedrostków ‘cyklo’, ‘seko’, ‘apo’, ‘homo’ i ‘nor’ mogą być zastosowane do opisu tej samej modyfikacji podstawowej struktury macierzystej, wybiera się kombinację zawierającą najmniejszą liczbę operacji. Obydwa rodzaje przedrostków,

rozłączne (np. alkilo) jak i nierozłączne (np. homo lub nor), można stosować do opisu modyfikacji lecz preferowane są przedrostki rozłączne. ‘Dihomo’, ‘dino’ itd. są rozumiane jako dwie modyfikacje każda (patrz lit. 16, reguła 3.S-6.3). Kiedy liczba operacji jest ta sama, połączenie homo/nor preferuje się w stosunku do cyklo/seko; wybór pomiędzy innymi kombinacjami wyrażającymi tą samą liczbę operacji jest oparty na alfabetycznej kolejności przedrostków.

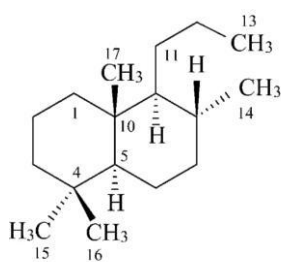
Przykłady:



podokarpan
(podstawowa struktura macierzysta)

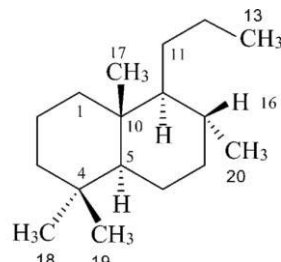


labdan
(podstawowa struktura macierzysta)



(I)

≡



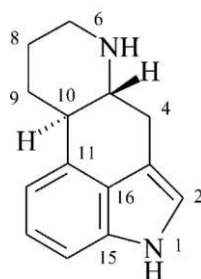
(II)

13,14-sekopodokarpan (I)

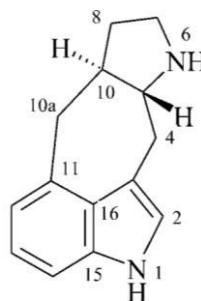
nie

8α-14,15,16-trinorlabdan (II)

Wyjaśnienie: Podokarpan może być przekształcony do ‘seko’ (I) w wyniku jednej operacji; ten sam związek (II) może być otrzymany z labdanu, ale w trzech operacjach.



ergolina
(podstawowa struktura macierzysta)



10(11)a-homo-9-norergolina
5,9-cyklo-5,10-sekoergolina
(9H)-5(10→9)-abeoergolina

P-101.3.7.2 Kolejność wymieniania połączonych przedrostków modyfikujących strukturę, musi unikać niewłaściwego stosowania przedrostków zdefiniowanych powyżej ani nie może prowadzić do nieprawdopodobnych wyników kiedy odpowiednie operacje są przeprowadzone w przepisany powyżej sposób.

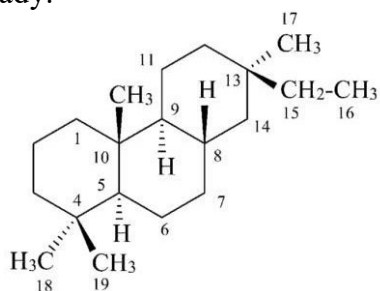
Po spełnieniu reguł P-101.3.7.1 i P-101.3.7.2 nierozłączne przedrostki wskazujące przegrupowanie wiązań (cyklo i seko) wymienia się przed tymi, które wskazują addycję lub usuwanie atomów szkieletu struktury (homo i nor). Jeżeli konieczna jest więcej niż jedna z tych operacji, przedrostki wymienia się w porządku alfabetycznym przed nazwą podstawowej struktury macierzystej. Multiplicyjne przedrostki opisujące wielokrotne operacje tego samego rodzaju nie wpływają na ich kolejność w nazwie.

Preferowana semi-systematyczna nazwa powstaje w wyniku tylko dwóch operacji zawierających przedrostki 'cyklo', 'seko', 'apo', 'homo' i 'nor'. W ogólnej nomenklaturze dozwolone są więcej niż dwie operacje. Nazwy zmodyfikowanych struktur tworzy się podając najpierw przedrostki opisujące przegrupowanie wiązań 'cyklo' i 'seko' (najdalej od macierzystej struktury) w porządku od lewej strony do prawej, a następnie przedrostki usuwania/dodawania 'nor' i 'homo' w porządku od lewej do prawej. Przedrostki podaje się przed nazwą struktury macierzystej. Schematycznie ten porządek jest następujący:

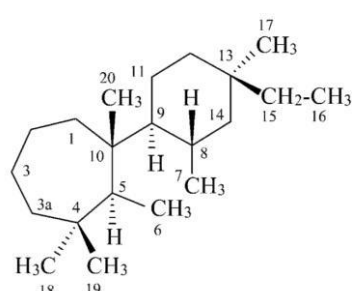
Operacja	przegrupowanie wiązań cyklo, seko	addycja/usunięcie atomów szkieletu apo, homo, nor	struktura macierzysta
----------	--------------------------------------	--	-----------------------

Nazwy, w których porządek przedrostków jest 'cyklo', 'seko', 'homo', 'nor' są preferowane w stosunku do tych, w których przedrostki wymienione są w porządku alfabetycznym, a więc 'apo', 'cyklo', 'homo', 'nor', 'seko'.

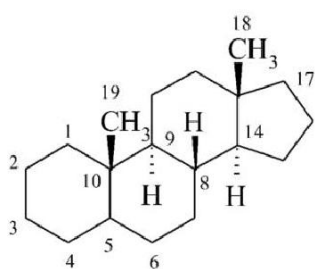
Przykłady:



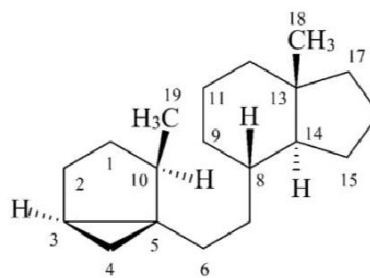
pimaran
(podstawowa struktura macierzysta)



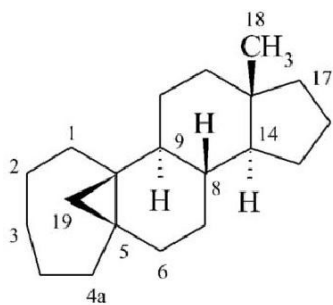
6,7-seko-3a-homopimaran
3a-homo-6,7-sekopimaran



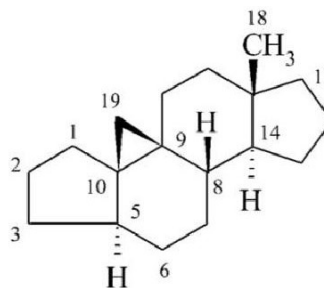
androstan
(podstawowa struktura macierzysta)



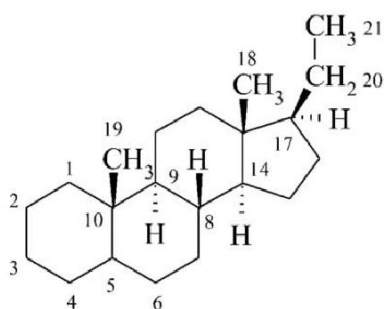
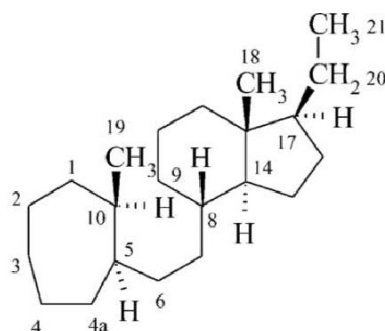
3a,5a-cyklo-9,10-seko-5a-androstan



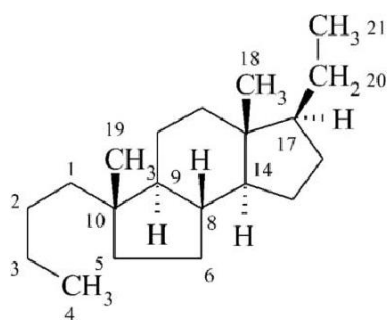
5β,19-cyklo-4a-homo-5β-androstan



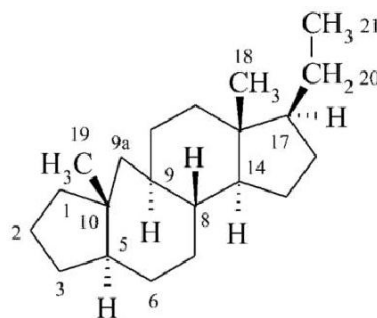
9β,19-cyklo-4-nor-5α,9β-androstan

pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)

9,10-seko-4a-homo-5α-pregnan



4,5-seko-7-norpregnan



9a-homo-4-nor-5α-pregnan

P-101.4 ZAMIANA ATOMÓW SZKIELETU

P-101.4.1 Ogólna metodologia

P-101.4.2 Zamiana atomów węgla szkieletu na heteroatomy

P-101.4.3 Zamiana heteroatomów szkieletu na atomy węgla

P-101.4.4 Zamiana heteroatomów szkieletu na inne heteroatomy

P-101.4.5 Wskazany atom wodoru

P-101.4.1 Ogólna metodologia

Reguły nomenklatury zamiennej 'a' szkieletu, która, jak opisano w P-15.4 i P-51.3 służy do modyfikacji struktur macierzystych, stosowane są w przypadku zastępowania atomów węgla szkieletu heteroatomami takimi jak O, S, N. W przeciwieństwie do zalecanej w poprawionej

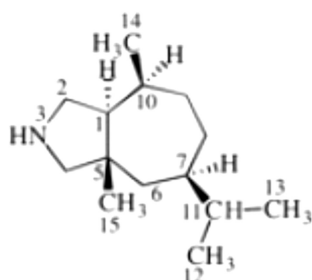
Części F (lit. 9) kolejności alfabetycznej nazw przedrostków zamiennych 'a', w nomenklaturze zamiennej zaleca się ich wymienianie według reguł starszeństwa określonych w P-15.4. Oprócz metodologii stosowanej do tworzenia nazw systematycznych, nomenklaturę zamienną 'a' szkieletu stosuje się w przypadku zamiany heteroatomów w strukturze macierzystej na atomy węgla lub inne heteroatomy.

P-101.4.2 Zamiana atomów węgla szkieletu na heteroatomy

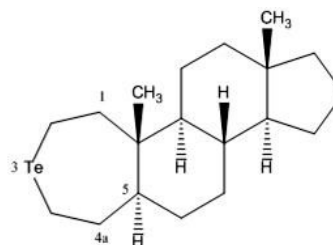
Heteroatomy wskazuje się przedrostkami zamiennymi 'a' które wymienia się przed przedrostkami nierozłącznymi modyfikującymi podstawową strukturę macierzystą, podając dla każdego z nich lokant wskazujący jego położenie; zachowana jest numeracja struktury macierzystej.

Nomenklaturę zamienną 'a' szkieletu można stosować po uwzględnieniu wszystkich modyfikacji szkieletu cząsteczki.

Przykłady:



3-azaambrozan

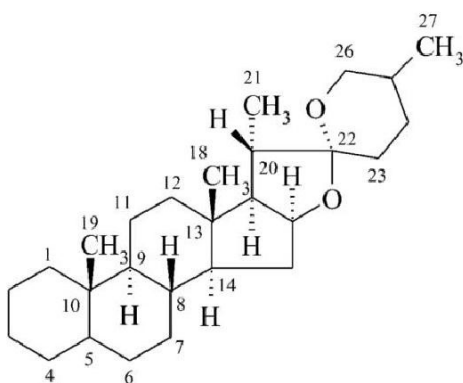


3-tellura-4a-homo-5α-androstan

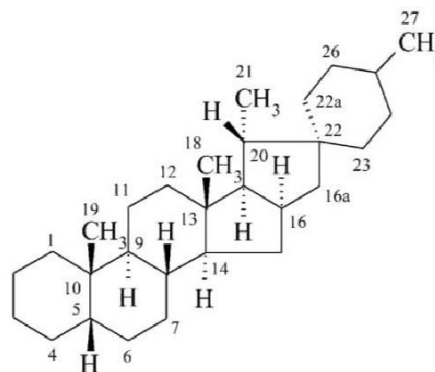
P-101.4.3 Zamiana heteroatomów szkieletu na atomy węgla

Zamianę heteroatomu w strukturze macierzystej na atom węgla wskazuje się przedrostkiem 'karba', z zachowaniem pierwotnej numeracji. Jeśli heteroatom w strukturze macierzystej nie posiadał lokantu, zastępującemu go atomowi węgla przypisuje się lokant złożony z najniższego lokantu spośród bezpośrednio związanych z nim atomów i litery 'a'. Jeżeli sąsiedni atom węgla o niższym numerze jest tzw. 'homo' atomem, używa się odpowiednio liter 'b', 'c' etc. Konfigurację nowego atomu węgla w cząsteczce określa się metodami stosowanymi do określania dodatkowej konfiguracji (patrz P-101.2.6.1).

Przykłady:



spirostan
(podstawowa struktura macierzysta)

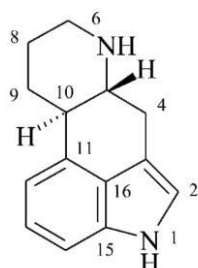


16a,22a-dikarba-5β-spirostan

P-101.4.4 Zamiana heteroatomów szkieletu na inne heteroatomy

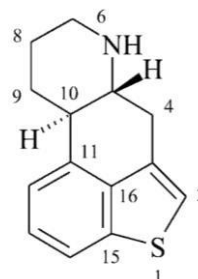
Zastąpienie heteroatomu w cząsteczce stereomacierzystego wodorku innym heteroatomem wskazuje się podając odpowiedni przedrostek zamienny ('a') oraz lokant.

Przykład:



ergolina

(podstawowa struktura macierzysta)

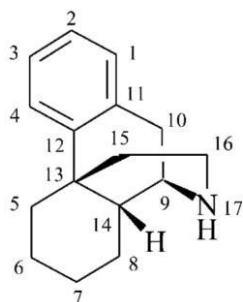


1-tiaergolina

P-101.4.5 Wskazany atom wodoru

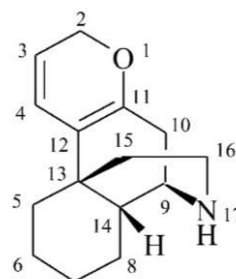
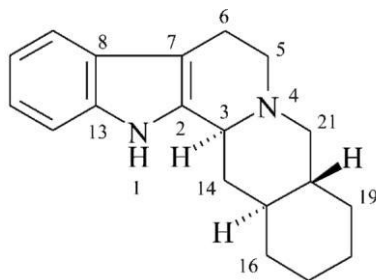
W przypadku, gdy zastąpienie atomu we fragmencie struktury macierzystej, zawierającym maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych lub będącym rozszerzonym sprzężonym układem wiązań podwójnych skutkuje powstaniem pozycji nasyconej, pozycję tą wskazuje się symbolem wskazanego atomu wodoru (patrz P-14.7; P-58.2).

Przykłady:



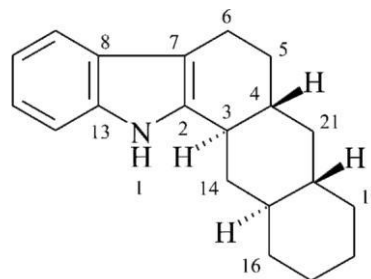
morfinan

(podstawowa struktura macierzysta)

2*H*-1-oksamorfinan

johimban

(podstawowa struktura macierzysta)

(4β*H*)-4-karbajohimban

P-101.5 ADDYCJA PIERŚCIENI I UKŁADÓW PIERŚCIENIOWYCH

Do struktur macierzystych mogą zostać przyłączone trzy typy pierścieni lub układów pierścieni

- P.101.5.1 Włączanie pierścieni lub układów pierścieni mancude z zastosowaniem nomenklatury skondensowanej
- P.101.5.2 Włączanie pierścieni lub układów pierścieni z zastosowaniem nomenklatury mostkowych pierścieni skondensowanych
- P.101.5.3 Włączanie pierścieni lub układów pierścieni z zastosowaniem nomenklatury spiranowej

Stosuje się tu, w pewnych przypadkach dostosowane do struktur macierzystych, opisane w rozdziałach od P-1 do P-8 metody wykorzystywane do tworzenia nazw systematycznych.

P.101.5.1 Włączanie pierścieni lub układów pierścieni mancude z zastosowaniem nomenklatury układów skondensowanych.

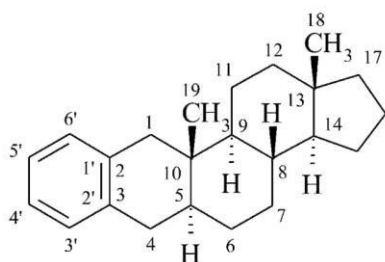
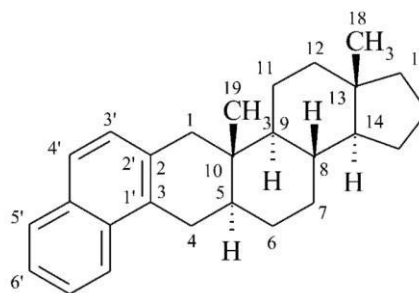
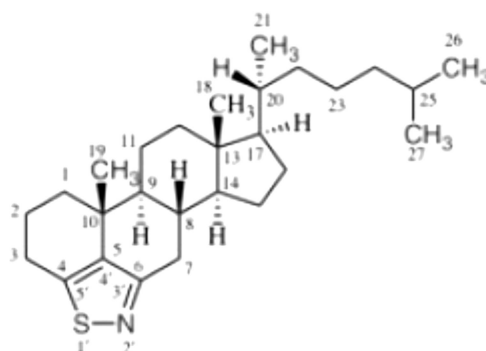
Podstawowa struktura macierzysta jako składnik jest stosowana w nomenklaturze skondensowanej w jej normalnym stopniu uwodornienia. W związku z tym w miejscu skondensowania nie wskazuje się wiązania podwójnego, ponieważ drugi składnik zawiera maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych. Ponadto, w przeciwieństwie do reguł opisanych w P-25, jako główną wybiera się zawsze podstawową strukturę macierzystą, a dołączony składnik musi stanowić pierścień lub układ pierścieni zawierający maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych.

P.101.5.1.1 Zgodnie z regułami określonymi w P-2, karbocykliczny lub heterocykliczny pierścień lub układ pierścieni traktowany jako macierzysty wodorek zawierający maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych, połączony ze strukturą macierzystą, wskazuje się jego przedrostkiem skondensowania (patrz P-25) poprzedzającym nazwę podstawowej struktury macierzystej. Atomy szkieletu struktury macierzystej w miejscu skondensowania określa się zwykłymi (nieprimowanymi) lokantami, a nie pisanymi kursywą literami 'a', 'b' etc., uczestniczące w skondensowaniu atomy szkieletu składnika mancude oznaczają się primowanymi lokantami. Miejsce skondensowania wskazuje się deskryptorem skondensowania zawierającym dwa zestawy lokantów; najpierw wymienia się zestaw lokantów dołączonego składnika, drugi zestaw odnosi się do głównego składnika podstawowej struktury macierzystej; oba zestawy lokantów, oddzielone dwukropkiem, ujmują się w kwadratowy nawias i umieszcza między nazwami obu składników. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, lokanty dołączonego składnika mancude są możliwe najniższe i wymieniane zgodnie z kierunkiem numerowania struktury macierzystej.

W anglojęzycznej literaturze wprowadzono zmianę w stosunku do wcześniejszych zaleceń. Nie pomija się końcowych samogłosek 'o' lub 'a' w nazwie przedrostka, jeżeli następująca po nich litera jest samogłoską, jak określono w zasadach zwykłej nomenklatury skondensowanej w P-25.3.1.3.

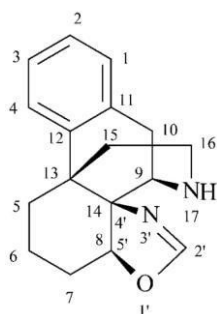
Dla polskiej nomenklatury ta zmiana nie ma znaczenia, ponieważ stosowane jest eufoniczne 'o' i końcowa litera 'a' nie jest opuszczana.

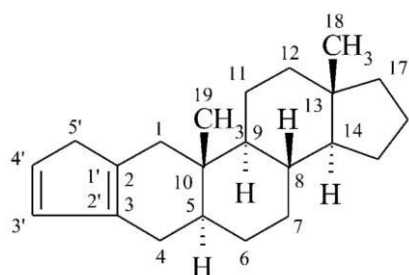
Przykłady:

benzo[2,3]-5 α -androstan
(lokanty 1',2' pomija się)nafto[2',1':2,3]-5 α -androstan[1,2]tiazolo[5',4',3':4,5,6]cholestan
(nie izotiazolo[5',4',3':4,5,6]cholestan;
nazwa izotiazol nie jest już zalecana
jako nazwa dołączonego składnika, patrz P-25.3.2.1.2)

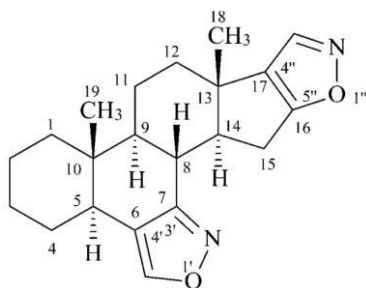
P.101.5.1.2 Przyłączony składnik skondensowany ze strukturą macierzystą jest związkiem mancude. Obecne w takim fragmencie pozycje nasyczone, również w miejscach skondensowania, w których występuje przynajmniej jeden atom wodoru, określa się wskazanym atomem wodoru. Określa się je również za pomocą deskryptorów składających się kolejno z lokantu, deskryptora konfiguracji 'α' lub 'β' i na końcu symbolem wskazanego atomu wodoru (patrz P-14.7), umieszczonym w nawiasach przed nazwą związku, podobnie jak to jest w przypadku stereodeskryptorów. Do określenia pozycji wskazanego atomu wodoru stosuje się lokanty przyłączonego składnika, chyba że istnieje wybór między nieprimowanymi i primowanymi lokantami, wtedy należy stosować lokanty (nieprimowane) stereomacierzystego wodoru.

Przykłady:

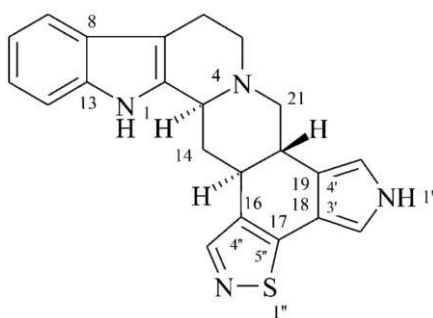
(8 α H)-[1,3]oksazolo[5',4':8,14]morfinan
nie 8 α H-oksazolo[5',4':8,14]morfinan;
nazwa oksazol bez lokantów heteroatomów
nie jest już zalecana jako składnik skondensowania; aby
nazwa była kompletna konieczny jest 'wskazany atom
wodoru' określony stereodeskryptorem (8 α H)]



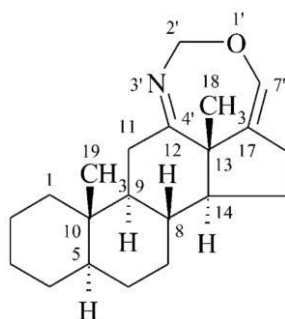
5'H-cyklopenta[2,3]-5α-androstan



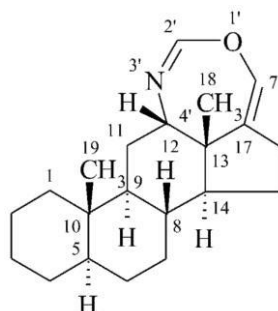
bis[1,2]oksazolo[4',3':6,7;5'',4'':16,17]-5α-androstan



1'H-pirololo[3',4':18,19][1,2]tiazolo[4'',5'':16,17]johimban



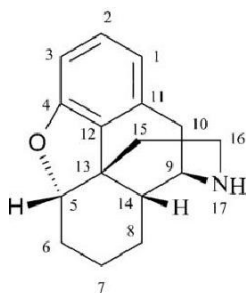
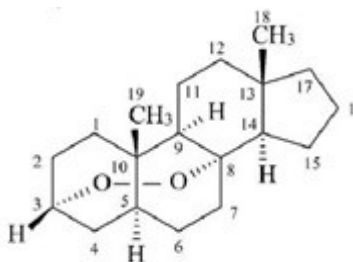
2'H-[1,3]oksazepino[4',5',6':12,13,17]-5α-androstan

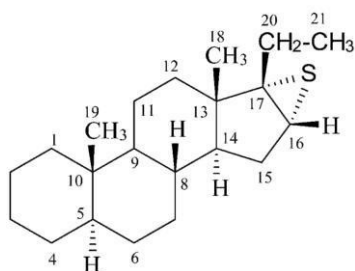
(12 β H)-12H-[1,3]oksazepino[4',5',6':12,13,17]-5 α -androstan

P.101.5.2 Pierścienie lub układy pierścieni włączone do nomenklatury mostkowych pierścieni skondensowanych

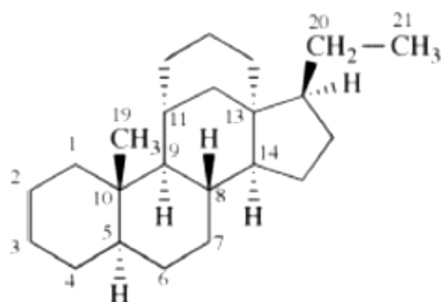
Atomowe mostki dołączone do podstawowej struktury macierzystej można opisywać metodami stosowanymi w nomenklaturze skondensowanej mostkowych układów skondensowanych pierścieni. Nazwy mostków określono w P-25.4. Metoda ta jest często stosowana dla mostków zawierających heteroatomy. W istocie do opisu niektórych typów pierścieni heterocyklicznych skondensowanych z podstawową strukturą maczystą metoda ta jest często bardziej użyteczna niż zasady nomenklatury skondensowanej opisane w P-101.5.1, na przykład ‘epoksy’ do wskazania mostka a nie ‘oksireno’ wskazujące skondensowany pierścień jako przyłączony składnik. Stosowanie atomowych mostków jest korzystniejsze niż nomenklatura skondensowana w odniesieniu do układów, w których połączone są dwa nie sąsiadujące atomy w podstawowej strukturze macierzystej [epoksydy i tioepoksydy są wyjątkami, ponieważ mogą być nazywane podstawnikowo (patrz P-63.5)]. Przedrostki wskazujące mostki są nierozłączne; wymienia się je w nazwie, przed przedrostkami określającymi modyfikacje szkieletu, a poprzedza odpowiednimi lokantami.

Przykłady:

4,5 α -epoksymorfinan
(5 β H)-5,13-dihydrofuro[2',3',4',5':4,12,13,5]morfinan3 α ,8-epidioksy-5 α ,8 α -androstan

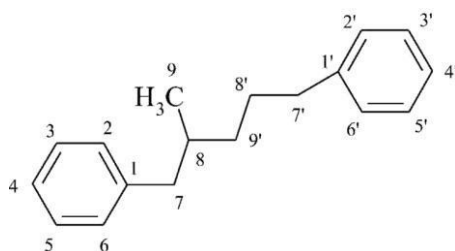


(16 β H)-tiireno[2',3':16,17]-5 α -pregnan (nazwa skondensowana)
16 α ,17-epitio-5 α -pregnan

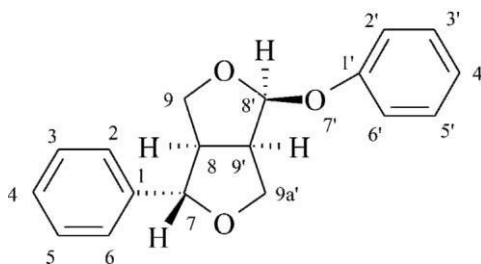


11 α ,18-etano-5 α ,13 α -pregnan
11 α ,13-propano-18-nor-5 α ,13 α -pregnan
11 α ,18-cyklo-12a,12b-dihomo-5 α -pregnan
11 α ,18b-cyklo-18a,18b-dihomo-5 α ,13 α -pregnan

Wyjaśnienie: Inwersja konfiguracji na atomie C-13 nie jest liczona jako operacja ponieważ nie modyfikuje szkieletu cząsteczki.



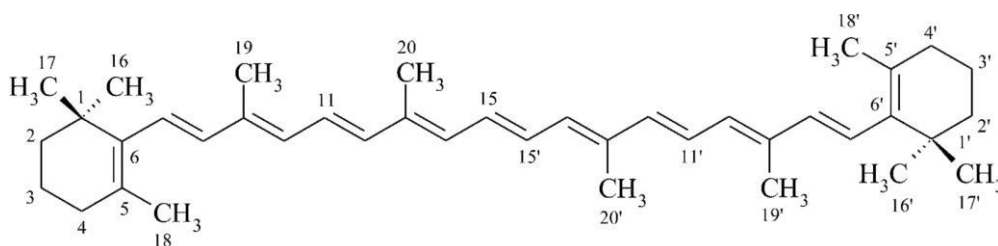
8,9'-neolignan (1,1'-(2-metylopentano-1,5-diylo)dibenzen



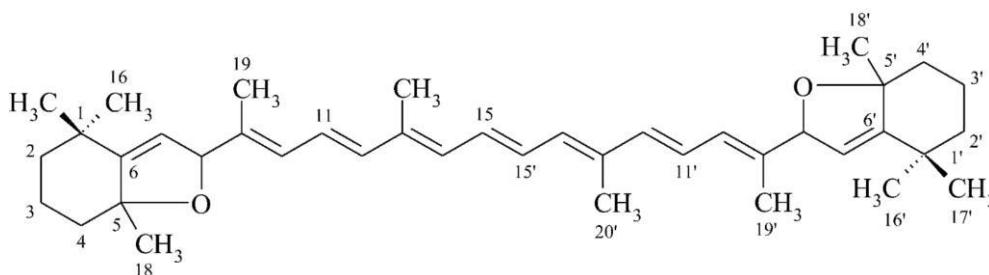
(7 α ,8 α ,8' β ,9' α)-7,9a':8',9-diepoksy-7'-oksa-9a'-homo-8,9'-neolignan
(1S,3aR,4S,6aR)-1-fenoksy-4-fenylotetrahydro-1H,3H-furo[3,4-c]furan

W przeciwieństwie do zaleceń nomenklatury systematycznej związków organicznych, w nomenklaturze karotenoidów (patrz lit. 40), mostek o nazwie ‘epoksy’ uważa się za rozłączny a przedrostki hydro/dehydro za nierozłączne. Nazwa poniższego β,β -karotenu zawierającego mostek jest zgodna z zasadami nomenklatury karotenoidów (lit. 39, Reguła Karotenoidowa 7.3) ale w sprzeczności z regułą 14.4.4.

Przykłady:



β,β -karoten (podstawowa struktura macierzysta)



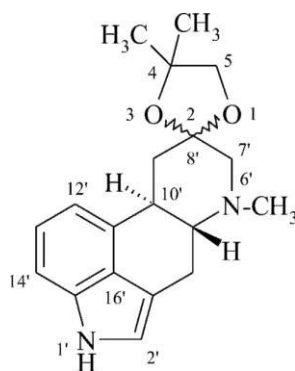
5,8:5',8'-diepoksi-5,8,5',8'-tetrahydro- β,β -karoten

(patrz podrozdział P-14.3.1 dotyczący użycia lokantów nieprimowanych i primowanych)

P.101.5.3 Pierścieni lub układy pierścieni włączone do nomenklatury spiranowej

Związki spiranowe nazywa się tak jak to zalecono w P-24.5 dla związków monospiranowych zawierających przynajmniej jeden składnik policykliczny.

Przykład:



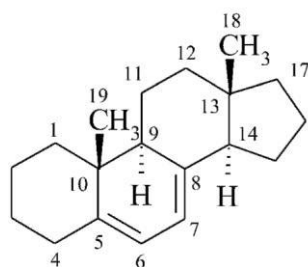
(2ξ)-4,4,6'-trimetylospiro[1,3-dioksolano-2,8'-ergolina]

P-101.6 MODYFIKACJA STOPNIA UWODORNIEŃ STRUKTUR MACIERZYSTYCH

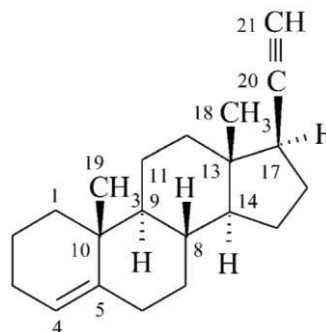
W stosunku do struktur macierzystych stosuje się ogólne zasady i reguły dotyczące zmiany stopnia uwodornienia macierzystych wodorków, określone w P-31. Końcówki ‘en’ i ‘yn’ (patrz P-31.1) oraz przedrostki ‘hydro’(patrz P-31.2) i ‘dehydro’(patrz P-31.3) stosuje się w zależności od tego czy wymagana jest operacja addycji czy subtrakcji. Nie ma limitu wprowadzania wiązań podwójnych w macierzystych wodorkach; przedrostki ‘hydro/dehydro’ można stosować w dowolnej wymaganej liczbie pod warunkiem, że nie tworzy się struktura mancude.

P-101.6.1 Nienasycenie w związku, którego macierzysta struktura jest w pełni nasycona lub w części struktury macierzystej, która jest w pełni nasycona i której nazwa kończy się na ‘an’, lub ‘anina’ wskazuje się zamianą końcówki ‘an’ na ‘en’ lub ‘yn’ i dodanie liczbowego przedrostka zwielokrotniającego, jak to opisano w P-31.1.1.2. Lokanty umieszcza się bezpośrednio przed częścią nazwy, której one dotyczą.

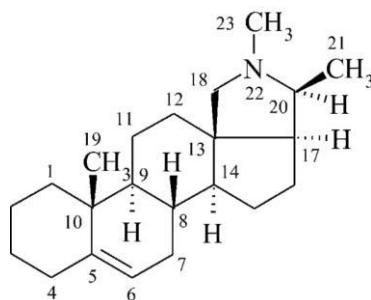
Przykłady:



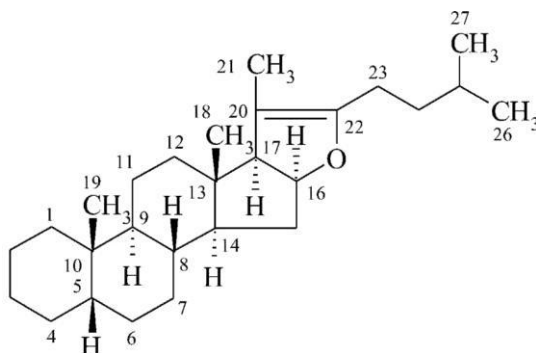
androsta-5,7-dien



pregn-4-en-20-yn



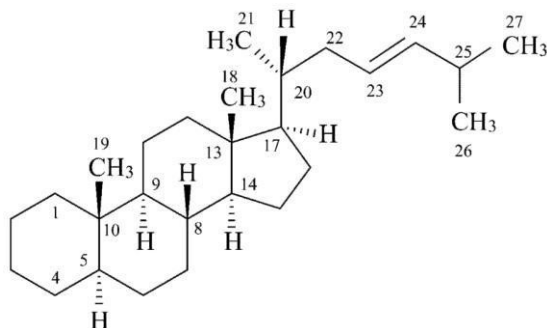
kon-5-enina



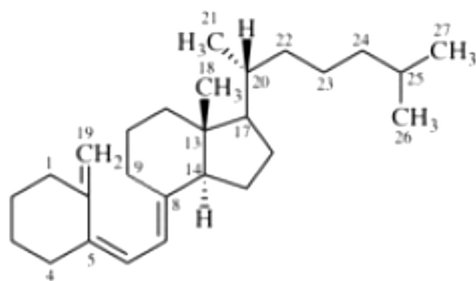
5β-furost-20(22)-en

P-101.6.2 Deskryptory ‘*E*’ lub ‘*Z*’ poprzedzone odpowiednimi lokantami stosuje się do określenia zmienionych lub dodatkowych konfiguracji wiązań podwójnych. Stereodeskryptory ‘*cis*’ i ‘*trans*’ stosuje się w nomenklaturze karotenoidów (lit. 40) i retinoidów (lit. 49).

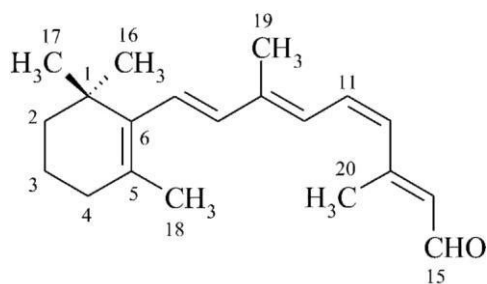
Przykłady:



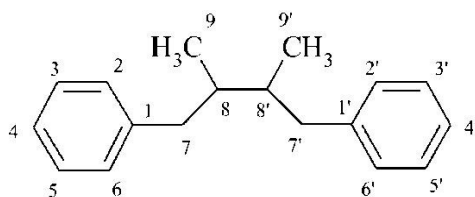
(23*E*)-5α-cholest-23-en



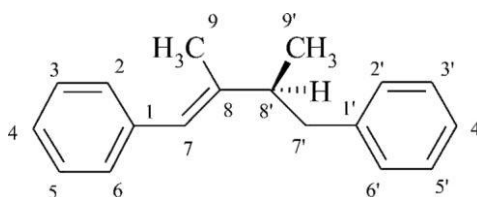
(5*Z*,7*E*)-9,10-sekcholesta-5,7,10(19)-trien



11-*cis*-retinal

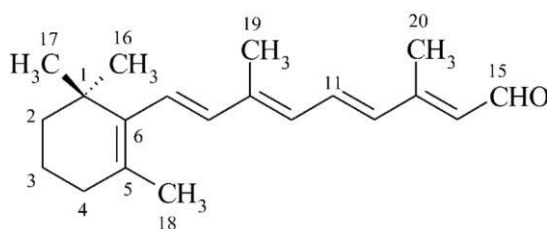


lignan
(podstawowa struktura macierzysta)

(7*E*,8'*S*)-lign-7-en[(1*E*,3*S*)-2,3-dimetylo-4-fenylobut-1-en-1-ylo]benzen1,1'-[(1*E*,3*S*)-(2,3-dimetylobut-1-en-1,4-diylo)]dibenzen

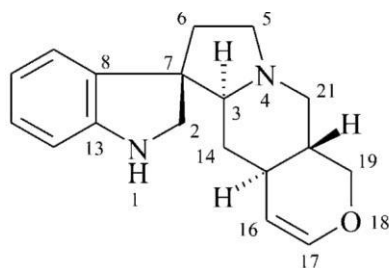
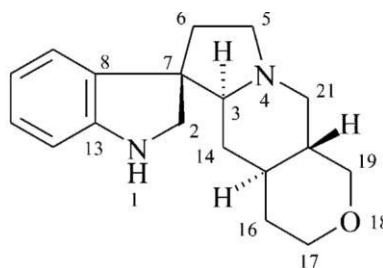
P-101.6.3 Przedrostek ‘*all*’ zapisany przed stereodeskryptorem wskazuje, że wszystkie konfiguracje są identyczne. Przedrostek ten stosuje się tylko w nomenklaturze produktów naturalnych, na przykład określenie ‘*all-trans*’ oznacza, że wszystkie wiązania podwójne w cząsteczce retinalu mają konfigurację ‘*trans*’.

Przykład:

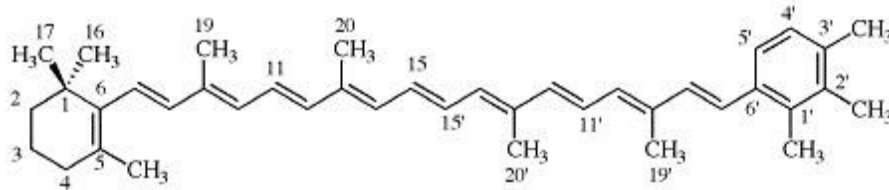
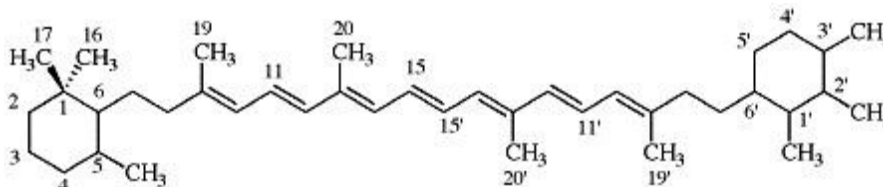
*all-trans*-retinal

P-101.6.4 Nasycenie wiązań podwójnych w strukturze macierzystej, której nazwa sugeruje obecność izolowanych wiązań podwójnych i/lub sprzężonego układu wiązań podwójnych, wskazuje się przedrostkiem ‘*hydro*’ poprzedzonym lokantami wskazującymi miejsca nasycenia. Przedrostek ‘*hydro*’ jest rozłączny i zawsze wymieniany bezpośrednio przed nazwą podstawowej struktury macierzystej (patrz P-31.2).

Przykłady:

formozan
(podstawowa struktura macierzysta)

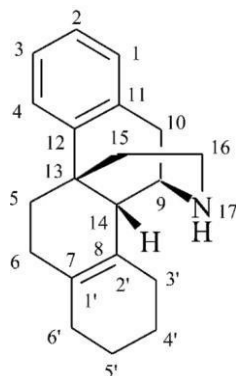
16,17-dihydroformozan

 β,γ -karoten5,6,7,8,1',2',3',4',5',6',7',8'-dodekahydro- β,γ -karoten

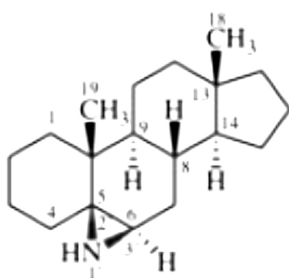
(patrz P-14.3.1 dotyczący użycia lokantów nieprimowanych i primowanych)

P-101.6.5 Nasycone lub częściowo nasycone pierścienie karbocykliczne lub heterocykliczne skondensowane z macierzystą strukturą nazywa się stosując przedrostki 'hydro'. Jeżeli jest możliwość wyboru pomiędzy nieprimowanymi i primowanymi, stosuje się lokanty nieprimowane.

Przykłady:

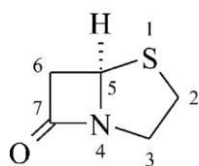


3',4',5',6'-tetrahydrobenzo[7,8]morfinan

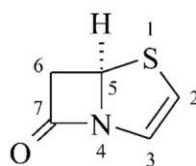
(6 α H)-1',6-dihydroaziryno[2',3':5,6]-5 β -androstan
[znaczenie symbolu (6 α H), patrz P-101.5.1.2]

P-101.6.6 Dodatkowe miejsce nienasycenia w stosunku do obecnych już w strukturze macierzystej, której nazwa nie kończy się na 'an' lub 'anina', zmiana wiązania podwójnego na potrójne i wprowadzenie dodatkowego podwójnego wiązania powiązane z przegrupowaniem wiązania już istniejącego, określa się przedrostkiem 'dehydro' wraz z przedrostkiem określającym liczbę usuniętych atomów wodoru wraz z odpowiednimi lokantami. Przedrostek 'dehydro' jest rozłączny i podawany zawsze przed nazwą podstawowej struktury macierzystej, ewentualnie po innych rozłącznych przedrostkach wymienionych w kolejności alfabetycznej.

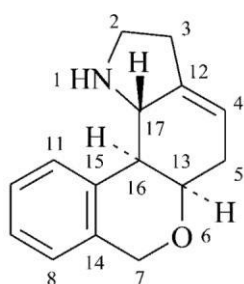
Przykłady:



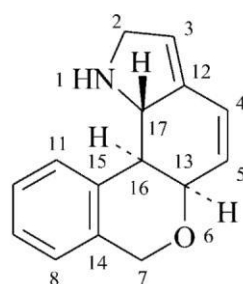
penam
(podstawowa struktura macierzysta)
(należy zwrócić uwagę na nową numerację)



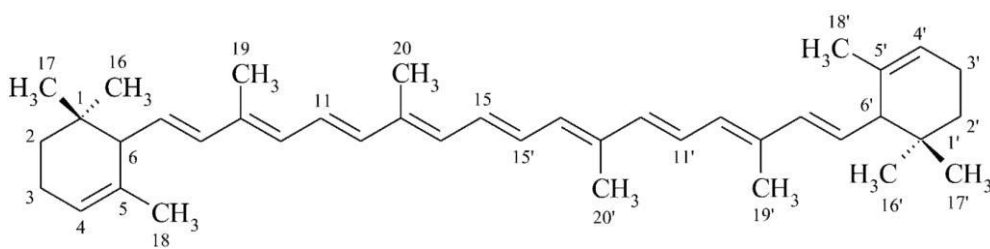
2,3-didehydropenam



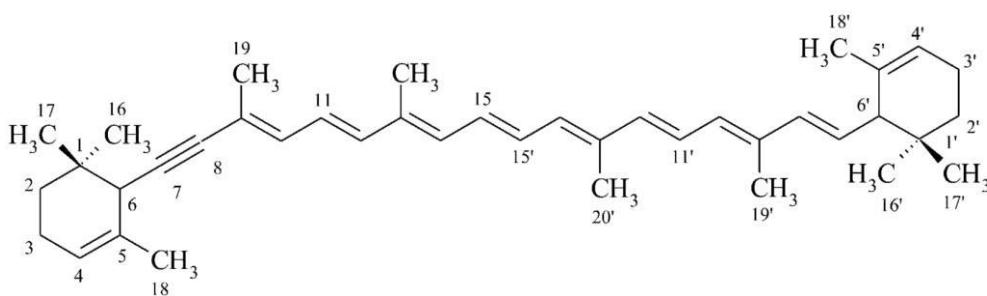
likorenan
(podstawowa struktura macierzysta)



3,5-didehydrolikorenan



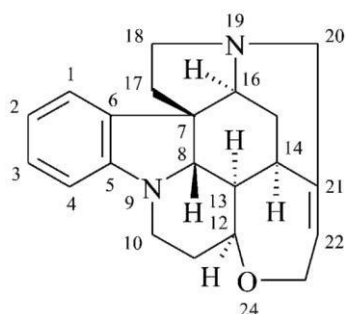
ϵ,ϵ -karoten
(podstawowa struktura macierzysta)



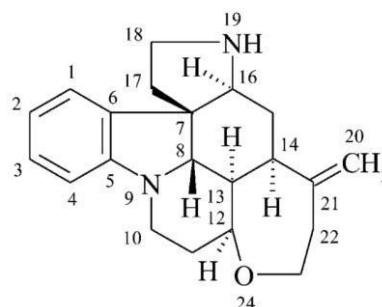
7,8-didehydro- ϵ,ϵ -karoten
(patrz P-14.3.1 dotyczący użycia nieprimowanych i primowanych lokantów)

P-101.6.7 Przegrupowanie wiązań podwójnych można wskazać stosując kombinację przedrostków ‘hydro’ i ‘dehydro’. Zgodnie z porządkiem alfabetycznym, przedrostek ‘dehydro’ wymienia się przed przedrostkiem ‘hydro’.

Przykład:



strychnidyna
(podstawowa struktura macierzysta)



20,21-didehydro-21,22-dihydro-19,20-sekstrychnidyna

P-101.7 POCHODNE STRUKTUR MACIERZYSTYCH

Pochodne struktur macierzystych nazywa się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami opisanymi w rozdziałach P-1 do P-9.

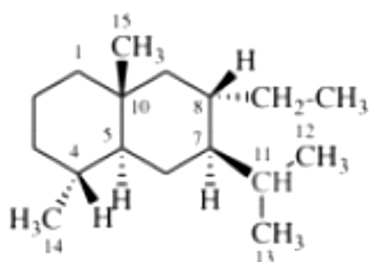
P-101.7.1 Przyrostki i przedrostki nomenklatury związków organicznych stosuje się w określony sposób do nazywania atomów i grup uznawanych za podstawiające atomy wodoru struktur macierzystych. Stereodeskryptory α , β , i ξ stosowane w celu opisu konfiguracji umieszczają się przed przedrostkiem lub przyrostkiem, poprzedzając odpowiednim lokantem. Tak utworzone nazwy podstawnikowe preferuje się względem nazw klasowo-funkcyjnych, z wyjątkiem niektórych cyklicznych grup funkcyjnych.

Podstawienie pierścieni oraz fragmentów końcowych rozpatruje się niezależnie.

P-101.7.1.1 Podstawienie grupami alkilowymi

P-101.7.1.1.1 Grupy organylowe takie jak grupy aryłowe i alkilowe wprowadza się zgodnie z nomenklaturą podstawnikową.

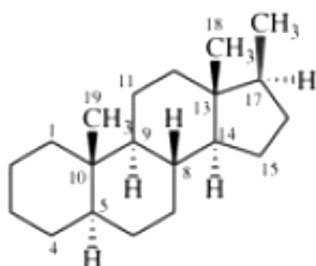
Przykład:



8 α -etyloeudesman

P-101.7.1.1.2 Stosując procedurę podstawnikową wprowadza się do androstanu grupę metylową w pozycję 17 α ; alternatywna metoda polegająca na subtrakcji grupy metylenowej z pregnanu z zastosowaniem nierozłącznego przedrostka 'nor' nie jest zalecana (patrz P-101-3.7.1).

Przykład:

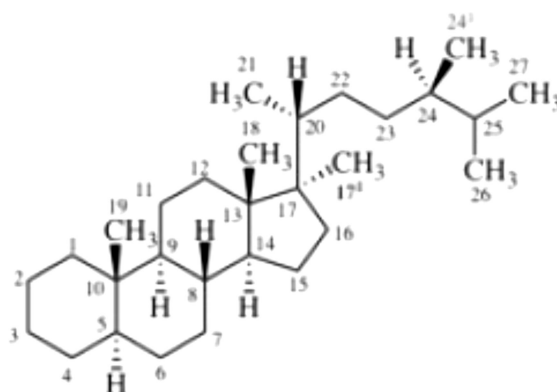


17 α -metylo-5 α -androstan
(nie 21-nor-5 α -pregnan)

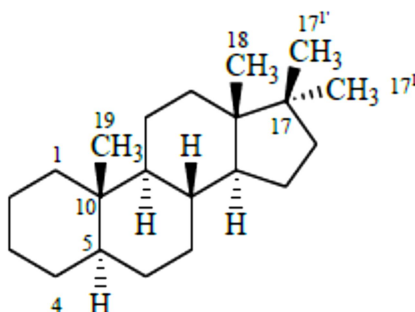
P-101.7.1.1.3 Reguła 3S-2.7 (lit. 16) opisuje metodologię nazywania steroidów mających

łańcuch boczny będący częścią macierzystego układu karbocyklicznego i podstawnik alkilowy przy C-17. Reguła 3S-2.7 podaje również metodologię nazywania steroidów z dwoma podstawnikami alkilowymi w pozycji C-17. Metodologia ta ma zastosowanie dla każdej podstawowej struktury macierzystej opisanej w P-101. Lokanty z numerem w indeksie górnym przeznaczone są do identyfikacji atomów np.: w przypisaniu sygnałów ^{13}C -NMR, a nie jako lokanty do wskazania dalszego podstawienia.

Przykłady:



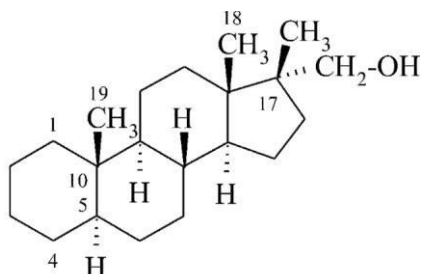
17-metylo-5 α -kampestan
(dodatkowa grupa metylowa w pozycji C-17 otrzymuje numer 17¹;
pozostałe atomy są numerowane jak zwykle)



17,17-dimetylo-5 α -androstan
(obie dodatkowe grupy metylowe otrzymują numer 17¹,
z tym, że grupa β -metylowa jest primowana)

P-101.7.1.1.4 Kiedy grupa charakterystyczna wymieniana w przyrostku, występuje w grupie alkilowej dodanej do podstawowej struktury macierzystej, stosuje się zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

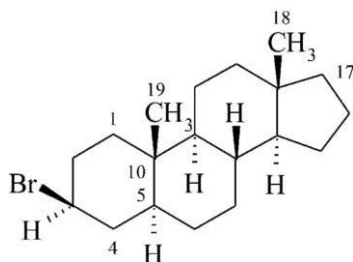


(17β-metylo-5α-androstan-17α-ylo)metanol
[nie (21-nor-5α-pregnan-17α-ylo)metanol]

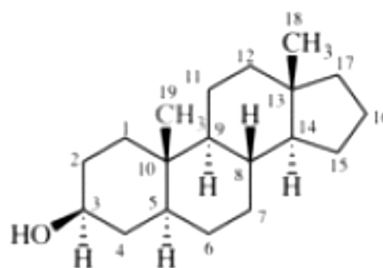
P-101.7.1.2 Podstawienie w pierścieniu

Przyrostki używa się zgodnie z porządkiem starszeństwa przyrostków, uwzględniając cykliczny charakter macierzystego wodorku. Przedrostki rozłączne wymienia się w porządku alfanumerycznym. Końcówki 'en' i 'yn' wskazuje się w normalny sposób. Przedrostki 'hydro-' i 'dehydro-' są rozłączne, a wymienia się je jako ostatnie wśród przedrostków rozłącznych.

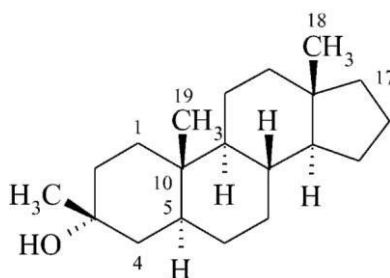
Przykłady:



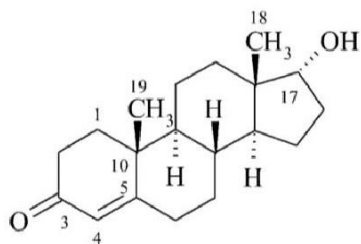
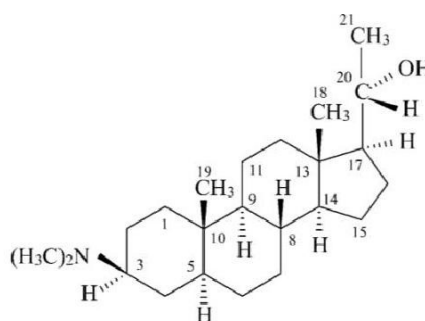
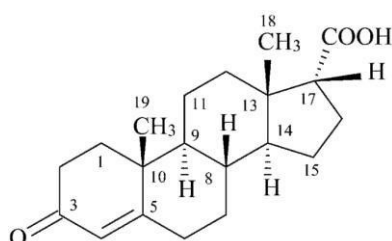
3β-bromo-5α-androstan
bromek 5α-androstan-3β-ylo



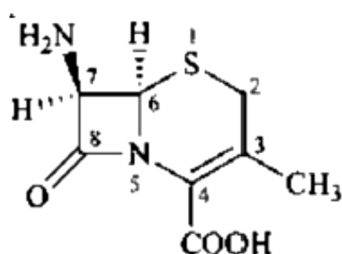
5β-androstan-3β-ol



3β-metylo-5α-androstan-3α-ol

17 α -hydroksyandrost-4-en-3-on(20*S*)-3 β -dimetylotyloamino)-5 α -pregnan-20-olkwas 3-oksoandrost-4-eno-17 α -karbonsyowy

[nie kwas 21-nor-5 α -pregnan-20-owy; prawidłowa nazwa zawiera najmniejszą liczbę operacji (patrz P-101.3.7.1)]

kwas (6*R*,7*R*)-7-amino-3-metylo-8-okso-5-tia-1-azabicyklo[4.2.0]okt-2-eno-2-karbonsyowykwas 7 β -amino-3-metylo-3,4-didehydrocefamo-4-karbonsyowy

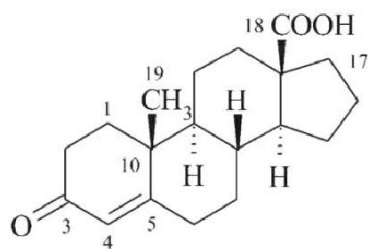
[należy zwrócić uwagę na nową numerację dla cefamu; jest inna niż podawana w odnośniku literaturowym (lit. 9)]

P-101.7.1.3 Podstawienie końcowych segmentów

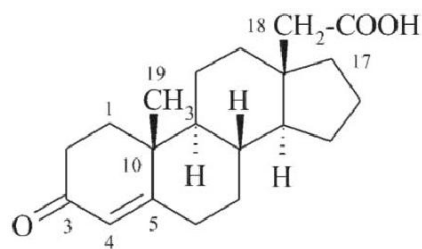
Zaleca się stosowanie przedrostków i przyrostków do nazywania grup charakterystycznych podstawiających końcowe segmenty, nawet gdy grupa charakterystyczna zawiera atom węgla.

Dopuszczalne jest wydłużanie końcowych segmentów o dwie grupy metylenowe i jest ono wskazywane przedrostkiem 'dihomo'. Dalsze przedłużenie jest również możliwe, ale z użyciem nazwy grupy alkilowej, jako wyjątek od reguły starszeństwa najdłuższego łańcucha.

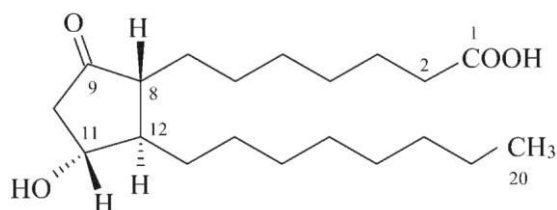
Przykłady:



kwas 3-oksoandrost-4-en-18-owy



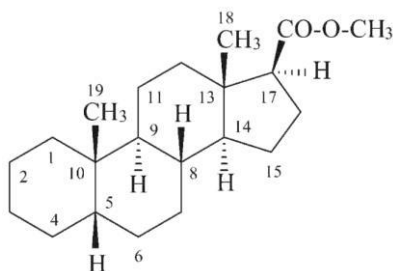
kwas 3-oksoandrost-4-eno-18-karboksylowy



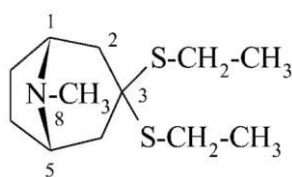
kwas 11 α -hydroksy-9-oksoprostan-1-owy

P-101.7.2 Modyfikacje głównych grup funkcyjnych, takich jak estry (patrz P-65.6.3.2), acetale (patrz P-66.6.5), itp. nazywa się zwykłymi metodami opisanymi w P-6. Cykliczne związki z tej grupy korzystniej jest nazywać laktonami, cyklicznymi acetalami, itp. niż układami skondensowanymi lub spiro, nawet jeśli te nazwy są nazwami klas funkcyjnych (patrz P-101.7.4).

Przykłady:



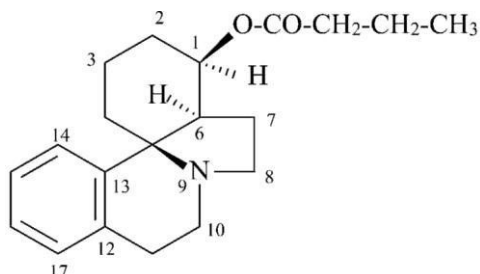
5 β -androstano-17 β -karboksylan metylu



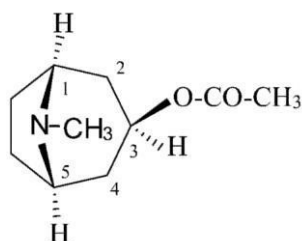
(1*R*,5*S*)-3,3-bis(etylosulfanylo)-8-metylo-8-azabicyklo[3.2.1.]oktan
3,3-bis(etylosulfanylo)tropan
ditioketal dietylowy tropan-3-onu

P-101.7.3 Nazwy podstawników pochodzących od struktur macierzystych tworzy się ogólnym sposobem opisanym w P-29, dodając przyrostki 'yl', 'ylideno' lub 'ylidyno' do odpowiedniej nazwy struktury macierzystej.

Przykłady:



butanian erytrynan-1 β -ylu



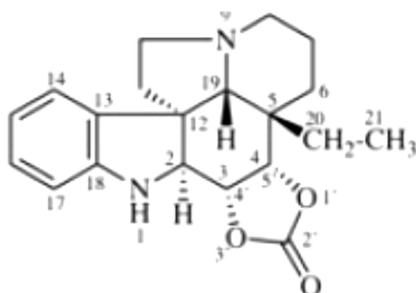
octan tropan-3 β -ylu

octan (1*R*,3*S*,5*S*)-8-metylo-8-azabicyklo[3.2.1]oktan-3-ylu
(patrz P-93.5.2.2.1)

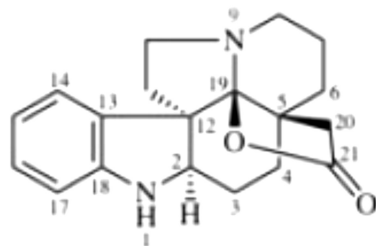
P-101.7.4 Addycja pierścieni jako grup funkcyjnych

Pierścienie jako grupy funkcyjne najkorzystniej nazywać stosując standardowy sposób tworzenia nazw systematycznych. Tworząc nazwy cyklicznych estrów i laktonów stosuje się ogólne metody nazywania estrów (patrz P-65.6.3.5.1). Acetale nazywa się stosując raczej reguły nomenklatury klasowo-funkcyjnej (patrz P-66.6.5) niż nomenklatury skondensowanej opisanej w P-101.5. Gdy możliwy jest wybór, preferowana jest nazwa skondensowana.

Przykłady:



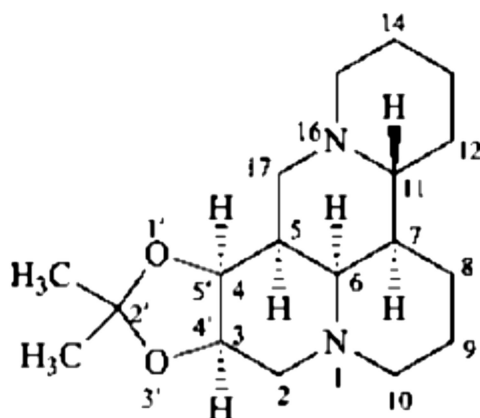
(3 β H,4 β H)-3,4-dihydro[1',3']dioksolo[4',5':3,4]aspidospermidyn-2'-on
karbonian aspidospermidyno-3 α ,4 α -diylu



19,21-epoksyaspidospermidyn-21-on

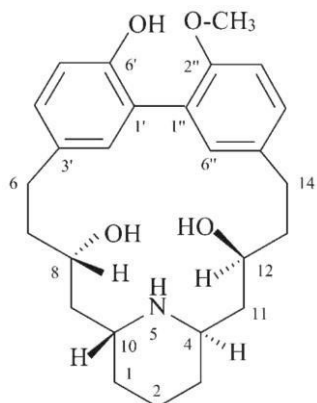
21-noraspidospermidyno-20,19-karbolakton (patrz P-65.6.3.5.1)

19-hydroksyaspidospermidyno-21,19-lakton

(3 α H,4 α H)-2',2'-dimetylo-3,4-dihydro[1',3']dioksolo[4',5':3,4]matrydynaketal matrydyno-3 β ,4 β -diylowy propan-2-onu (patrz P-66.6.5)ketal matrydyno-3 β ,4 β -diylowy acetonu

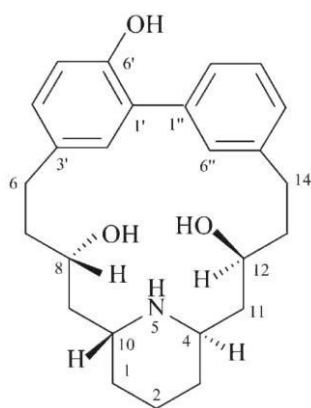
P-101.7.5 Przedrostek 'de' (nie 'des'), poprzedzający nazwę grupy albo atomu (innego niż wodór) oznacza usunięcie takiej grupy lub atomu i, jeśli to konieczne, wstawienie w jego miejsce atomu wodoru. Przedrostek 'de' jest obecnie stosowany w nomenklaturze węglowodanów (patrz P-102.5.3) do wskazania usunięcia atomu tlenu z grupy –OH i dołączenie w to miejsce atomu wodoru.

Przykłady:

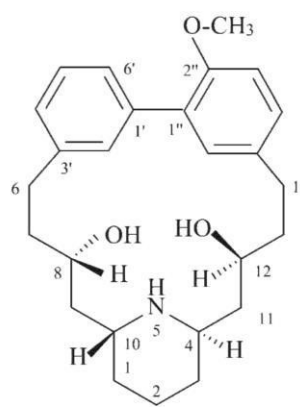


litranidyna

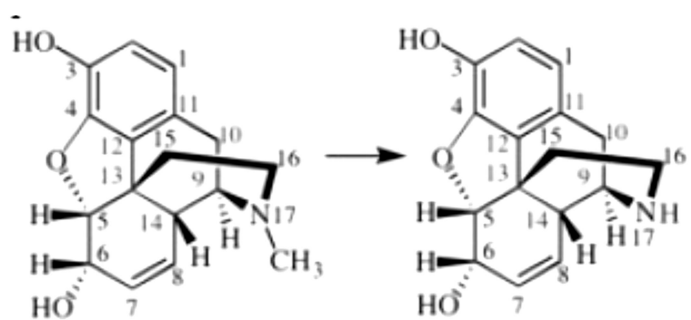
(podstawowa struktura macierzysta)



2''-demetoksylitranidyna



6'-deoksylitranidyna



I

morfina

II

demetylmorfina

I (5 β H)-17-metylo-7,8-didehydrofuro[2',3',4',5':4,12,13,5]morfinano-3,6 α -diol

II (5 β H)-7,8-didehydrofuro[2',3',4',5':4,12,13,5]morfinano-3,6 α -diol

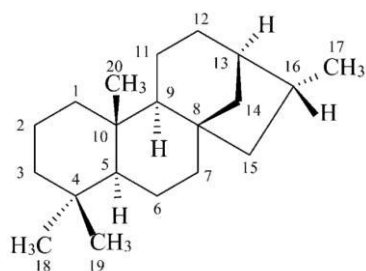
P-101.8 DALSZE ASPEKTY OKREŚLANA KONFIGURACJI

Oprócz określenia absolutnej konfiguracji podstawowych i modyfikowanych struktur macierzystych przy użyciu stereodeskryptorów : ' α ', ' β ', ' ξ ', ' R ' i ' S ', należy opisać wiele innych właściwości stereochemicznych, stosując do tego celu zasady, reguły i konwencje opisane w P-9.

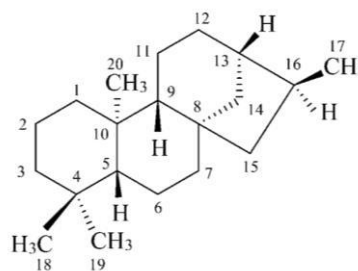
P-101.8.1 Inwersja konfiguracji

Inwersję konfiguracji wszystkich centrów chiralności wskazuje się pisanym kursywą przedrostkiem '*ent*' (skrótowa forma '*enantio*') umieszczonym na początku pełnej nazwy związku. Przedrostek ten oznacza inwersję wszystkich centrów chiralności (włączając centra, przy których znajdują się nazwane podstawniki), zarówno tych wymienianych oddzielnie jak i zawartych w nazwie związku. Poniżej przedstawiono poprawne struktury i nazwy dla kauranu i '*ent*'-kauranu; te oznaczenia są odwrotnością używanych przez Chemical Abstracts (patrz lit. 21).

Przykład:



kauran



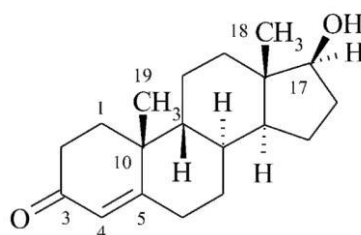
ent-kauran

P-101.8.2 Racematy

Racematy oznacza się w nazwie pisanym kursywą przedrostkiem '*rac*' (skrót od *racemo*) na początku pełnej nazwy związku, łącznie z przedrostkiem '*epi*', jeśli taki występuje. W przypadku związku racemicznego struktura rysowanego enancjomeru powinna pokazywać jak najmniejszą liczbę centrów chiralności o α -konfiguracji. Może to się różnić od zwykłej praktyki, która polega na rysowaniu struktury enancjomerycznej mającej taką samą konfigurację absolutną jak naturalnie występująca substancja.

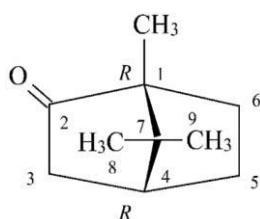
P-101.8.3 Konfiguracja względna

Jeżeli jest znana względna, a nie absolutna, relacja konfiguracji centrów chiralności wskazuje się ją symbolem '*rel*' wspólnie z *R* lub *S* (preferowane względem '*R*^{*}' i/lub '*S*^{*}') według reguły P-93.5.1.2. Enancjomery o znanej względnej ale nie absolutnej konfiguracji można odróżniać za pomocą stereodeskryptora (+)-*rel* lub (-)-*rel*, gdzie plus i minus oznaczają kierunek skręcania płaszczyzny światła spolaryzowanego (linia D światła sodowego). Stąd, prawoskrętną formę poniższej struktury powinno się nazwać: (+)-*rel*-17 β -hydroksy-8 α ,9 β -androst-4-en-3-on.



P-101.8.4 Stereodeskryptory '*R*' i '*S*' stosuje się do opisu absolutnej konfiguracji centrów stereogenicznych związku, którego struktura macierzyta jest achiralna, na przykład bornanu. Stosuje się je również zamiast przedrostków ' α ', ' β ', ' ξ ', kiedy pierścień jest otwarty tworząc dwie chiralne części, z których jedna może się obracać, jak w przypadku witaminy D.

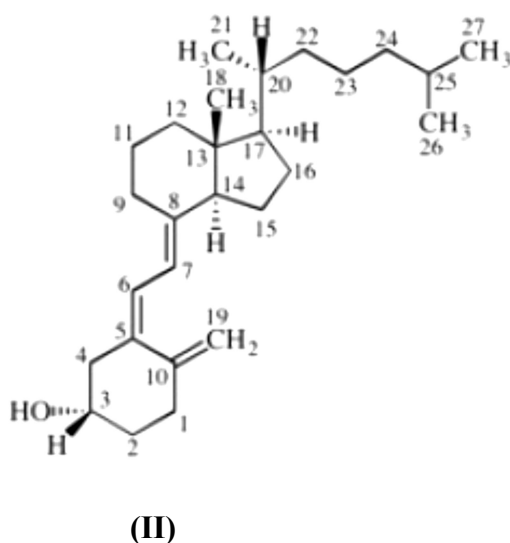
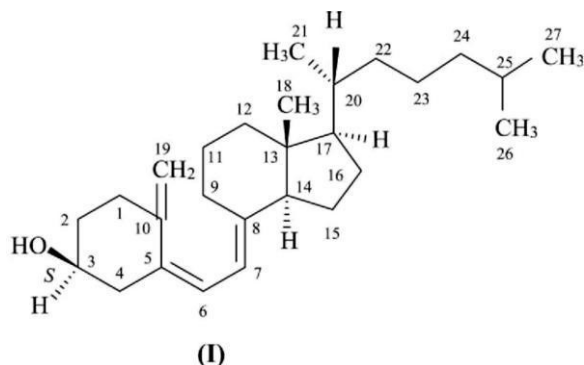
Przykłady:



(1*R*,4*R*)-bornan-2-on

(+)-kamfora

(1*R*,4*R*)-1,7,7-trimetylobicyklo[2.2.1]heptan-2-on



(I) jest jednoznaczny z **(II)**

(3*S*,3*Z*,7*E*)-9,10-sekcholestan-5,7-10(19)-trien-3-ol

[struktury **(I)** i **(II)** są dwoma konformacjami tej samej pochodnej 3-hydroksy]

P-102 NOMENKLATURA WĘGLOWODANÓW

P-102.0 WPROWADZENIE

Nomenklatura węglowodanów oparta jest na nazwach struktur macierzystych monosacharydów mających zachowane nazwy. Ich struktury i nazwy można modyfikować w celu wskazania obecnych w ich strukturze grup charakterystycznych, to jest aldehydowej, karboksylowej, alkoholowej. Monosacharydy mogą również łączyć się tworząc di-, tri- i oligosacharydy.

Nomenklatura węglowodanów została w ostatnim czasie poprawiona [lit. 26]. Ten rozdział opisuje podstawowe zasady tej szczególnego typu nomenklatury, a zwłaszcza rozwinięty system symboli i stereodeskryptorów stosowanych w celu określenia konfiguracji wielu diastereoizomerów oraz enancjomerów.

- P.102.1 Definicje
- P-102.2 Macierzyste monosacharydy
- P-102.3 Symbolika konfiguracyjna
- P-102.4 Wybór struktury macierzystej
- P-102.5 Monosacharydy: aldozy i ketozy; deoksy i aminocukry
- P-102.6 Monosacharydy i ich pochodne jako podstawniki
- P-102.7 Disacharydy i oligosacharydy

P.102.1 DEFINICJE

- P.102.1.1 Węglowodany
- P.102.1.2 Monosacharydy
- P.102.1.3 Oligosacharydy
- P.102.1.4 Polisacharydy

P.102.1.1 Węglowodany

Ogólny termin ‘węglowodany’ obejmuje monosacharydy, oligosacharydy i polisacharydy, a także związki pochodzące z redukcji grupy karbonylowej w monosacharydach (alditole), z utlenienia jednej lub więcej grup końcowych do kwasów karboksylowych lub z wymiany jednej lub więcej grup hydroksylowych na atom wodoru, grupę aminową, grupę tiolową lub podobne grupy heteroatomowe. Termin ten obejmuje również pochodne tych związków. Termin ‘cukier’ jest często stosowany do monosacharydów i niższych oligosacharydów.

Cyklitolii na ogół nie uważa się za węglowodany. Ich nomenklatura podlega innym zaleceniom (patrz P-104 i lit. 39).

P.102.1.2 Monosacharydy

Macierzyste monosacharydy są polihydroksyaldehydami $H-[CHOH]_n-CHO$ lub polihydroksyketonami $H-[CHOH]_m-CO-[CHOH]_n-H$ o trzech lub więcej atomach węgla.

Ogólny termin ‘monosacharydy’ (jako przeciwstawny do oligo- i polisacharydów) określa pojedynczą jednostkę bez wiązań glikozydowych z innymi takimi samymi jednostkami. Obejmuje on aldozy, dialdozy, aldoketozy, ketozy i diketozy, a także deoksycukry, aminocukry i ich pochodne, pod warunkiem, że macierzysty związek ma grupę karbonylową (ewentualnie potencjalną).

Dla monosacharydów stosuje się zarówno nazwy zwyczajowe jak i systematyczne. Wiele nazw zwyczajowych, takich jak glukoza, fruktoza i inne, jest zachowana i używana do opisu odpowiedniego funkcyjnego związku macierzystego. Ten aspekt nomenklatury węglowodanów jest ograniczony, bowiem dotyczy jedynie monosacharydów mających 4 - 6 atomów węgla. ‘Systematyczna nomenklatura węglowodanów’ została opracowana i jest stosowana dla związków z czterema i większą liczbą atomów węgla. Jest ona szeroko używana przez chemików dla cukrów z większą liczbą atomów węgla niż 6 oraz dla cukrów nienasyconych oraz rozgałęzionych. W tych zaleceniach nazwy te określa się mianem ‘systematyczne nazwy węglowodanów’, w celu odróżnienia ich od nazw systematycznych tworzonych według zasad, reguł i konwencji nomenklatury podstawnikowej omawianej w rozdziałach P-1 do P-9; określanej jako ‘nazwy podstawnikowe’ albo ‘systematyczne nazwy podstawnikowe’ (opis i ilustracje dwóch typów nomenklatury patrz P-102.5.2.3).

P.102.1.2.1 Aldozy i ketozy

Monosacharydy z aldehydową grupą karbonylową lub potencjalną aldehydową grupą karbonylową nazywa się aldozami. Monosacharydy z ketonową grupą karbonylową lub potencjalną grupą karbonylową nazywa się ketozami.

Dodatek numerycznego przedrostka (np.: ‘pent’, ‘heks’) wskazuje liczbę obecnych atomów węgla (np. aldopentoza, ketohekszoza).

Termin ‘potencjalna grupa aldehydowa’ odpowiada grupie hemiacetalowej, utworzonej z zamknięcia pierścienia; termin ‘potencjalna grupa ketonowa’ odpowiada grupie hemiketalowej.

Cykliczne hemiacetale lub hemiketale cukrów z pierścieniem pięciocząłowym (oksolanu lub tetrahydrofuranu) nazywa się furanozami, a te z sześciocząłowym pierścieniem (oksanu lub tetrahydropiranu) - piranozami.

Monosacharydy zawierające dwie (potencjalne) grupy aldehydowe nazywa się dialdozami. Monosacharydy zawierające dwie (potencjalne) grupy ketonowe nazywa się diketozami. Monosacharydy zawierające jedną (potencjalną) grupę aldehydową i jedną (potencjalną) grupę ketonową nazywa się ketoaldozami; termin ten jest preferowany względem ‘aldoketoz’ i ‘aldozouloz’.

P.102.1.2.2 Deoksycukry

Monosacharydy, w których alkoholowa grupa hydroksylowa została zastąpiona przez atom wodoru są nazywane ‘deoksycukrami’.

P.102.1.2.3 Aminocukry

Monosacharydy, w których alkoholowa grupa hydroksylowa została zastąpiona grupą aminową są nazywane aminocukrami. Jeśli zastąpiona jest hemiacetalowa grupa hydroksylowa poprzez grupę aminową, to związki nazywane są ‘glikozyloaminami’.

P.102.1.2.4 Glikozydy

Glikozydy są mieszanymi acetalami formalnie powstającymi przez eliminację wody z hemiacetalowej/hemiketalowej grupy hydroksylowej cukru i grupy hydroksylowej drugiego związku. Wiązanie między tymi dwoma składnikami nazywa się ‘wiązaniami glikozydowymi’.

P.102.1.3 Oligosacharydy

Oligosacharydy są związkami, w których jednostki monosacharydowe połączone są wiązaniami glikozydowymi. Zależnie od liczby jednostek nazyw się je: disacharydami, trisacharydami, itd. Maksymalna liczba jednostek nie jest zdefiniowana.

P.102.1.4 Polisacharydy

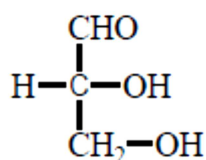
‘Polisacharyd’ (glikan) jest nazwą nadawaną makromolekułom złożonym z dużej liczby reszt (jednostek) monosacharydowych (glikoz) połączonych wiązaniami glikozydowymi. Termin poli(glikoza) nie jest synonimem polisacharydu (glikanu), ponieważ obejmuje również monosacharydowe reszty połączone wiązaniami nie glikozydowymi.

P-102.2 MACIERZYSTE MONOSACHARYDY

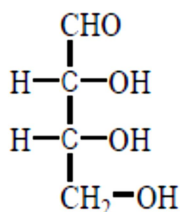
P-102.2.1 Podstawą nazw monosacharydów są ich struktury macierzyste w postaci acyklicznej. Tabele 10.2 i 10.3 podają nazwy zwyczajowe macierzystych aldoz i ketoz zawierających do 6 atomów węgla. Te nazwy zwyczajowo używa się, kiedy acykliczne aldozy lub ketozy mają łańcuch węglowy zbudowany z czterech, pięciu lub sześciu atomów węgla. Gdy węglowy szkielet cukru zbudowany jest z więcej niż sześciu atomów węgla stosuje się systematyczne nazwy węglowodanów.

W Tabeli 10.2 zostały przedstawione wzory, zapisane w postaci łańcuchowej, oraz zachowane nazwy aldoz o 3-6 atomach węgla. Zaprezentowano tylko formy D monosacharydów; formy L są ich odbiciami lustrzanymi.

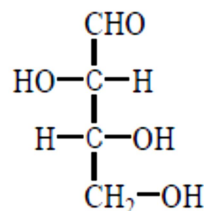
Tabela 10.2 Zachowane i systematyczne nazwy węglowodanowe oraz struktury
(w acyklicznej formie aldehydowej) **aldoz o 3 do 6 atomach węgla.**



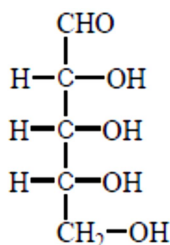
(2*R*)-2,3-dihydroksypropanal
aldehyd D-glicerynowy
D-*glicero*-trioza



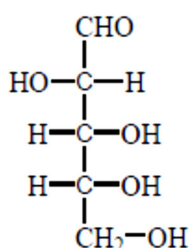
D-erytroza
D-*erythro*-tetroza



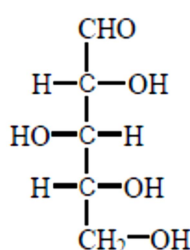
D-treoza
D-*treo*-tetroza



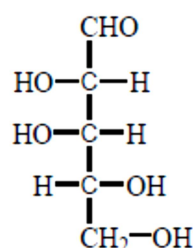
D-ryboza
D-*rybo*-pentoza



D-arabinoza
D-*arabino*-pentoza



D-ksyloza
D-*ksylo*-pentoza



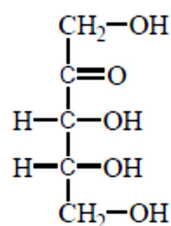
D-liksoza
D-*likso*-pentoza

$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $
D-alloza D-allo-heksoza	D-altroza D-altro-heksoza	D-glukoza D-gluko-heksoza	D-mannoza D-manno-heksoza
$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $
D-guloza D-gulo-heksoza	D-idoza D-ido-heksoza	D-galaktoza D-galakto-heksoza	D-taloza D-talo-heksoza

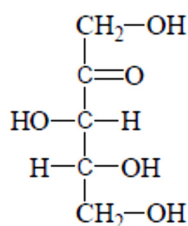
W Tabeli 10.3 zostały przedstawione zachowane nazwy 2-ketoz o 3 - 6 atomach węgla oraz struktury (ketonowej acyklicznej formy). Zaprezentowano tylko formy D monosacharydów; formy L są ich odbiciami lustrzanymi.

Tabela 10.3. Struktury oraz zachowane i systematyczne nazwy węglowodanowe 2-ketoz o 3 do 6 atomach węgla

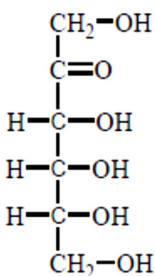
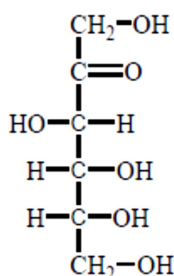
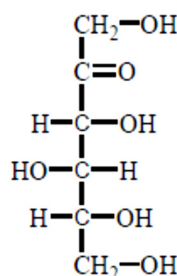
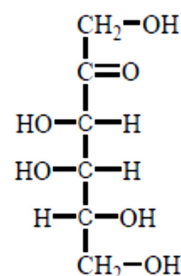
$ \begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{OH} \\ \\ \text{C}=\text{O} \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} $	1,3-dihydroksypropan-2-on 1,3-dihydroksyaceton gliceron
$ \begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{OH} \\ \\ \text{C}=\text{O} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array} $	D-erytruloza



D-rybuloza



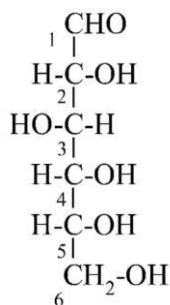
D-ksyluloza

D-psikoza
D-rybo-heks-2-ulozaD-fruktoza
D-arabino-heks-2-ulozaD-sorboza
D-ksylo-heks-2-ulozaD-tagatoza
D-likso-heks-2-uloza**P-102.2.2** Numerowanie struktur macierzystych

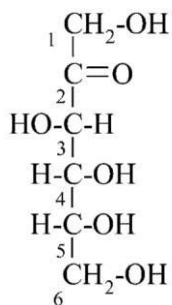
Atomy węgla monosacharydu numeruje się kolejno w następujący sposób:

- (1) Grupa (potencjalnie) aldehydowa otrzymuje lokant 1 (nawet wtedy, gdy obecna jest grupa charakterystyczna o wyższym starszeństwie;
- (2) Inne grupy charakterystyczne o jak najwyższym starszeństwie, wymieniane jako przyrostki, otrzymują możliwie najniższe lokanty,
np.: grupa karboksylowa (pochodne) > grupa (potencjalnie) ketonowa karbonylowa.

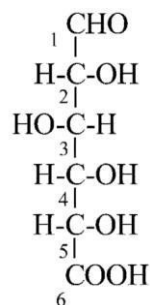
Przykłady:



D-glukoza



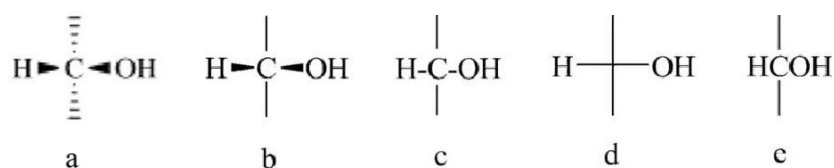
D-fruktoza



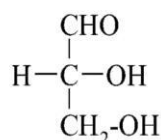
kwas D-glukuronowy

P-102.3 SYMBOLIKA KONFIGURACYJNA**P-102.3.1** Projekcja Fishera izomerów łańcuchowych

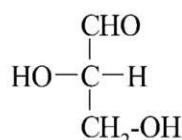
W tej projekcji łańcuch węglowy monosacharydu zapisuje się pionowo, z atomem węgla o najniższym lokancie u góry, jak pokazano w P-102.2.2. Przy określaniu stereochemii każdy rozważany kolejno atom węgla umieszcza się jako leżący w płaszczyźnie papieru; sąsiadujące atomy węgla leżą pod, a atom H i grupa –OH nad płaszczyzną papieru. Poniżej podane są różne sposoby przedstawiania, ‘b’, ‘c’, ‘d’ i ‘e’ atomu węgla w monosacharydzie w projekcji Fishera (struktura ‘a’ jest trójwymiarową reprezentacją, rzeczywistą projekcją Fishera jest ‘d’). W niniejszych zaleceniach na ogół stosowana jest reprezentacja ‘c’.

**P-102.3.2** Stereodeskryptory ‘D’ i ‘L’

Najprostszą aldozą jest aldehyd glicerynowy. Ma on jedno centrum chiralności, stąd występuje w dwóch odmianach enancjomerycznych, zwanych aldehydem D-glicerynowym i aldehydem L-glicerynowym; przedstawiają je poniższe wzory projekcyjne Fishera. Wiadomo że te projekcje odpowiadają konfiguracjom absolutnym. Stereodeskryptory konfiguracyjne ‘D’ oraz ‘L’ pisze się mniejszymi dużymi literami i oddziela od nazwy cukru łącznikiem. Konfiguracja jest często opisywana symbolami *R* i *S* według konwencji CIP.



aldehyd D-glicerynowy
(2*R*)-2,3-dihydroksypropanal

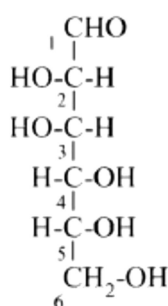


aldehyd L-glicerynowy
(2*S*)-2,3-dihydroksypropanal

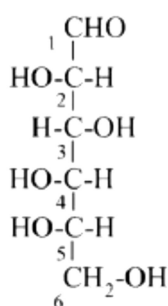
P-102.3.3 Atom konfiguracyjny

Monosacharyd należy do szeregu D lub L zależnie od konfiguracji centrum chiralności o najwyższym lokancie. Ten asymetrycznie podstawiony atom węgla nazywa się ‘atomem konfiguracyjnym’. I tak, jeśli jego grupa hydroksylowa jest rzutowana na prawo w projekcji Fishera, to cukier należy do szeregu D i otrzymuje stereodeskryptor ‘D’.

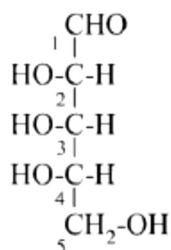
Przykłady:



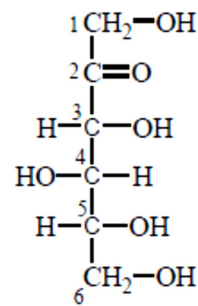
D-mannoza



L-glukoza



L-ryboza



D-sorboza

P-102.3.4 Cykliczne formy monosacharydów

Większość monosacharydów występuje jako cykliczne hemiacetale lub hemiketale. Należy wziąć pod uwagę dwa aspekty wewnętrznej cyklizacji monosacharydów: pierwszy to wielkość pierścienia a drugi to konfiguracja nowo powstałego centrum chiralności.

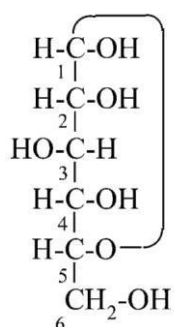
P-102.3.4.1 Wielkość pierścienia

Spośród różnych możliwych wielkości heterocyklicznych pierścieni będącego wynikiem tworzenia hemiacetali lub hemiketali, pięcio- i sześcioczłonowe, wliczając atom tlenu, są uprzywilejowane i będą omówione w tym rozdziale. Ich nazwy są oparte na nazwach macierzystych struktur heterocyklicznych, odpowiednio, furanu i piranu. Nazwy tworzy się przez włączenie terminu 'furan' i 'piran' przed końcówką 'oza' w nazwie cukru. Na przykład: D-mannoza jest zmieniana na D-mannopiranozę, co wskazuje cykliczną formę pierścienia sześcioczłonowego; co więcej ogólny termin 'piranoza' obejmuje wszystkie cukry zawierające strukturę sześcioczłonowego pierścienia. Podobnie cukry mające strukturę pięcioczłonowych pierścieni są 'furanozami'. Cykliczne struktury trój-, cztero- i siedmioczłonowe nazywa się, odpowiednio, 'oksyrozami', 'oksetozami' i 'septanozami'.

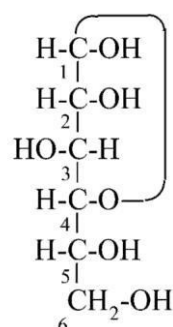
Należy uwzględnić różne reprezentacje form pierścieniowych.

P-102.3.4.1.1 Utworzenie hemiacetalu lub hemiketalu w projekcji Fishera formy cyklicznej przedstawia się rysując długie wiązanie łączące wyjściową grupę aldehydową lub ketonową z atomem tlenu uczestniczącym w pierścieniu.

Przykłady:



D-glukopiranoza

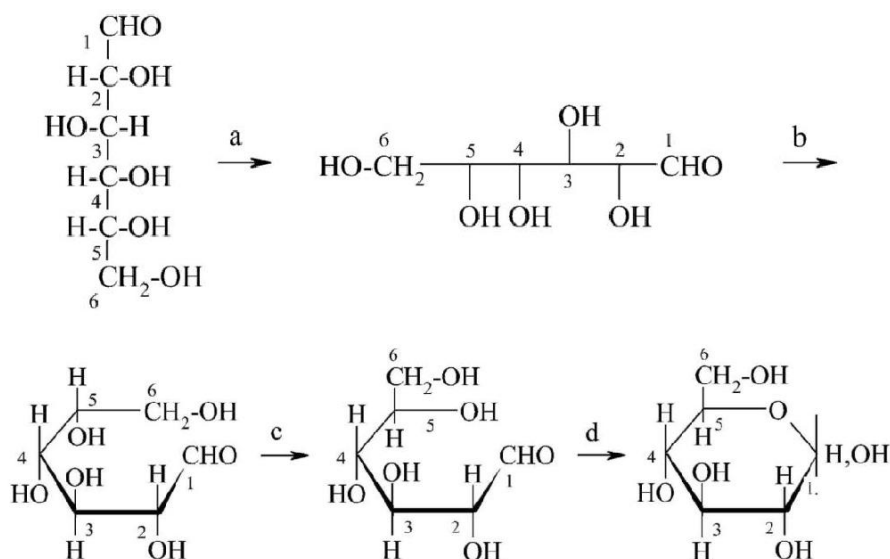


D-glukofuranoza

P-102.3.4.1.2 Projekcje Hawortha

Projekcja Hawortha jest rysunkiem perspektywicznym. Pierścień jest zorientowany prawie prostopadle do płaszczyzny papieru ale obserwowany nieco z góry, przez co krawędź bliższa obserwatora jest rysowana niżej niż krawędź dalsza z atomem tlenu z tyłu i C-1 na prawym krańcu.

Proces cyklizacji przedstawia się jako zachodzący etapami, co pokazano na rysunku 10.1 na przykładzie D-glukopiranozy.



Rysunek 10.1 Reorientacja projekcji Fishera na projekcję Hawortha.

Do przeprowadzenia acetalizacji lub ketalizacji są konieczne dwie reorientacje standardowej projekcji Fishera. Pierwsza reorientacja (etap a) polega na pionowym umieszczeniu nieterminalnych grup hydroksylowych; druga reorientacja (etap c) polega na reotacji na atomie węgla C-5, w celu umieszczenia atomu tlenu w płaszczyźnie pierścienia. Sposób cyklizacji musi być jednoznacznie zdefiniowany poprzez określenie konfiguracji na atomie C-1.

P-102.3.4.2 Formy anomeryczne; stereodeskryptory ‘α’ i ‘β’

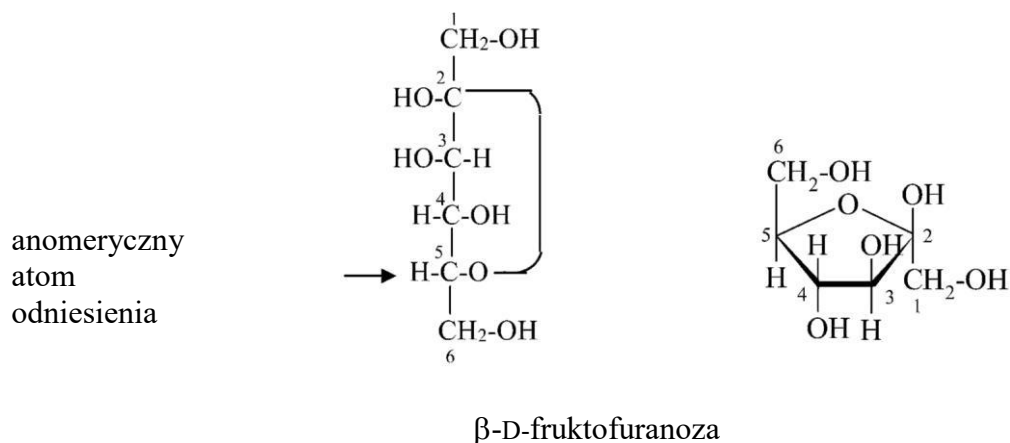
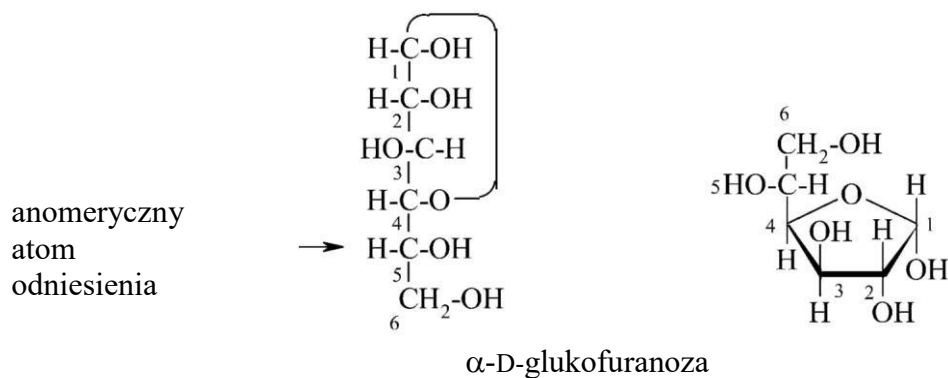
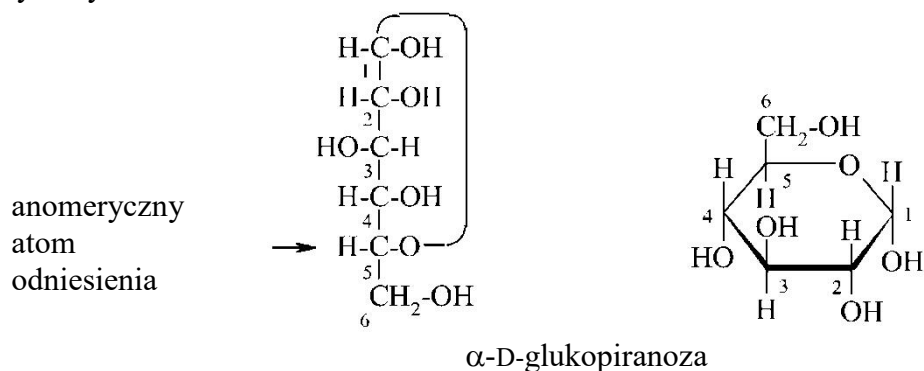
P-102.3.4.2.1 Należy określić konfigurację nowo utworzonego centrum chiralności przy C-1. To centrum nazywa się centrum anomerycznym. Nowe stereoizomery nazywa się ‘anomerami’, i oznacza się je stereodeskryptorami ‘α’ oraz ‘β’, stosownie do względnej konfiguracji centrum anomerycznego względem konfiguracji centrum referencyjnego.

P-102.3.4.2.2 Konfiguracja ‘α’ oraz ‘β’ monosacharydów

Anomerycznym centrum referencyjnym monosacharydu mającego zachowaną nazwę jest atom konfiguracyjny, jak zdefiniowano w P-102.3.3. W projekcji Fishera egzocykliczny atom tlenu centrum anomerycznego, w anomerze α, jest formalnie *cis* względem tlenu związanego z anomerycznym referencyjnym atomem; w anomerze β relacja jest *trans*. W celu określenia konfiguracji *cis* i *trans* płaszczyzna odniesienia jest prostopadła względem projekcji Fishera, zawierając wszystkie atomy węgla monosacharydu.

‘Stereodeskryptor anomeryczny’ ‘ α ’ lub ‘ β ’ z łącznikiem umieszcza się bezpośrednio przed stereodeskryptorem konfiguracyjnym ‘D’ lub ‘L’ nazwy węglowodanu.

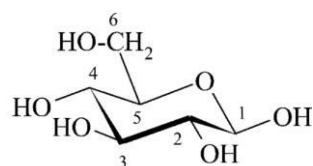
Przykłady:



P-102.3.5 Konformacja monosacharydów

Piranozy przyjmują konformacje nie planarne. Na przykład β -D-glukopiranoza przyjmuje konformację krzesłową z charakterystycznymi podstawnikami w położeniu ekwatorialnym (atomy wodoru przyłączone do pierścienia są pominięte).

Przykład:

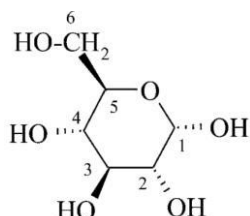


β -D-glukopiranoza

P-102.3.6 Wzory Millsa

W takim wzorze główny pierścień hemiacetalowy jest rysowany w płaszczyźnie papieru; wiązania przerywane oznaczają podstawniki pod tą płaszczyzną, a wiązania pogrubione – nad płaszczyzną.

Przykład:



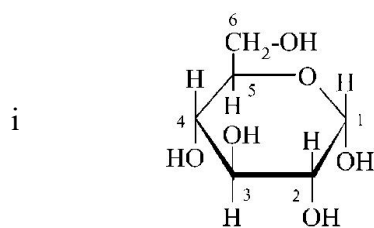
α -D-glukopiranoza

P-102.3.7 Stereodeskryptory dla określenia racematów oraz nieokreślonej konfiguracji

P-102.3.7.1 Stereodeskryptory dla określenia racematów

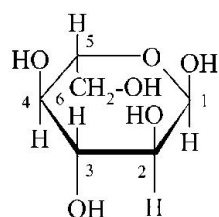
Racematy wskazuje się stereodeskryptorem 'DL'.

Przykłady:

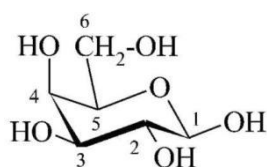


D-konfiguracja

α -DL-glukopiranoza



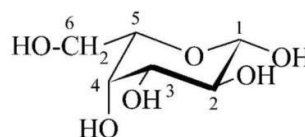
L-konfiguracja



D-konfiguracja

β -DL-galaktopiranoza

i

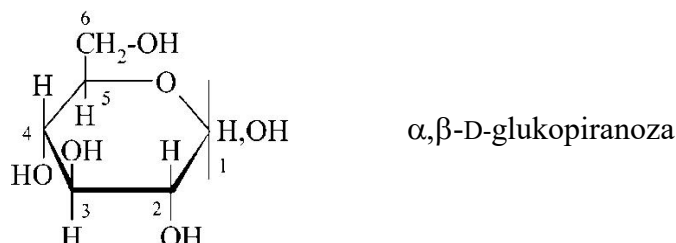


L-konfiguracja

P-102.3.7.2 Mieszaniny anomerów

W przypadku opisywania mieszaniny anomerów, stereodeskryptory ' α ' i ' β ' umieszcza się bezpośrednio przed nazwą oddzielając je przecinkiem; we wzorach Hawortha symbole H i OH zastępują wiązania przy anomerycznym atomie węgla.

Przykład:

**P-102.4** WYBÓR STRUKTURY MACIERZYTEJ

Jeśli w dużej cząsteczce wbudowana jest więcej niż jedna struktura monosacharydu, to wyboru struktury macierzystej dokonujemy stosując kolejno następujące kryteria, aż do rozstrzygnięcia:

- a) struktura macierzysta zawierająca grupę funkcyjną najstarszą w porządku klas (patrz P-41). Jeśli możliwy jest wybór, to dokonujemy go na podstawie największej liczby występowania najstarszych grup funkcyjnych.

I tak: kwas ketoalдарowy / kwas alдарowy > kwas ketouronowy / kwas uronowy / kwas ketoaldonowy / kwas aldonowy > dialdoza > ketoaldoza / aldoza > diketoza > ketoza.

- b) struktura macierzysta o większej liczbie atomów węgla w łańcuchu, np.: heptoza > heksoza.

- c) struktura macierzysta pierwsza w porządku alfabetycznym opartym na:

- (i) nazwie zwyczajowej lub przedrostku konfiguracyjnym nazwy systematycznej, np.: glukoza > guloza; pochodna *gluko* > *gulo*,

Przykład: D-glucitol, nie L-gulitol (patrz P-102.5.6.5.1).

- (ii) symbolu konfiguracyjnym: D > L,

Przykład: 5-O-metylo-D-galaktitol, nie 2-O-metylo-L-galaktitol (patrz P-102.5.6.5.2)

- (iii) stereodeskryptorze anomerycznym: α > β ,

Przykład: 1,2':1',2-dianhydrid α -D-fruktofuranozy β -D-fruktofuranozy, nie 1,2':1',2-dianhydrid β -D-fruktofuranozy α -D-fruktofuranozy (patrz P-102.5.6.7.2).

- d) struktura macierzysta mająca więcej podstawników wymienianych w przedrostku (podstawienie mostkowe, np.: 2,3-O-metyleno jest tu traktowane jako dwa podstawniki). Przedrostek 'deoksy' i 'anhydro' są rozłączne i uporządkowane alfabetycznie a więc traktowane jako osobne podstawniki.

- e) struktura macierzysta z najniższymi lokantami dla podstawników wymienianych w przedrostku,

Przykład: 2,3,5-tri-*O*-metylo-D-mannitol przed 2,4,5-tri-*O*-metylo-D-mannitol (patrz P-102.5.6.5.3(a)).

- f) struktura macierzysta z najniższym lokantem dla podstawnika wymienianego jako pierwszy, Przykład: 2-*O*-acetylo-5-*O*-metylo-D-mannitol, nie 5-*O*-acetylo-2-*O*-metylo-D-mannitol [patrz P-102.5.6.5.3(b)].

P-102.5 MONOSACHARYDY: ALDOZY I KETOZY; DEOKSY- I AMINOCUKRY

P-102.5.1 Aldozy

P-102.5.2 Ketozy

P-102.5.3 Deoksycukry

P-102.5.4 Aminocukry

P-102.5.5 Tiocukry

P-102.5.6 Podstawione monosacharydy

P-102.5.1 Aldozy

Aldozy mają nazwy zachowane lub tworzone podstawnikowo. Zachowane i semi-systematyczne węglowodanowe nazwy aldoz zawierających od trzech do sześciu atomów węgla są wymienione w Tabeli 10.2.

Nazwy aldoz zawierających więcej niż sześć atomów węgla tworzone są w dwojaki sposób: według procedur systematycznej nomenklatury węglowodanowej lub systematycznej nomenklatury podstawnikowej.

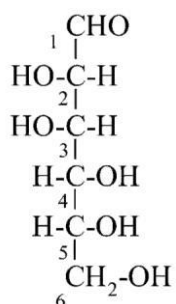
P-102.5.1.1 Systematyczne nazwy węglowodanowe

Systematyczne węglowodanowe nazwy aldoz tworzy się z nazwy rdzenia i przedrostka konfiguracyjnego (lub przedrostków). Aldozy zawierające od trzech do dziesięciu atomów węgla mają następujące nazwy rdzeni: trioza, tetroza, pentoza, heksoza, heptoza, oktoza, nonoza, dekoza.

Łańcuch numeruje się tak, aby grupa karbonylowa miała lokant '1'.

P-102.5.1.1.1 Konfigurację grup >CHOH cukru wyraża się przedrostkiem (lub przedrostkami) wymienionymi w Tabeli 10.2, np.: '*glicero*', '*gluko*', '*manno*', itd. Każda nazwa określona jest stereodeskryptorem D lub L, jak opisano w P-102.3.2.

Przykład:

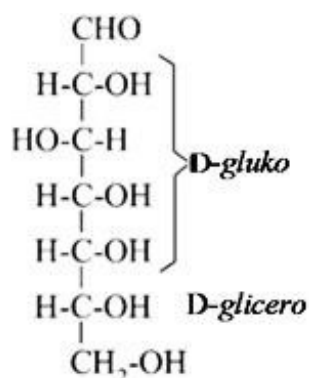


D-*manno*-heksoza (systematyczna nazwa węglowodanowa)

D-mannoza (nazwa zachowana)

P-102.5.1.1.2 Aldozy zawierające więcej niż cztery centra chiralności nazywa się dodając dwa (lub więcej) przedrostki konfiguracyjne do nazwy rdzenia. Przedrostki, przypisuje się kolejno grupom centrów chiralności, w grupach po cztery, zaczynając od grup położonych najbliżej grupy aldehydowej. Przedrostek odnoszący się do grupy atomów węgla dalszych od grupy aldehydowej (może zawierać mniej niż cztery centra chiralności) wymienia się w nazwie jako pierwszy.

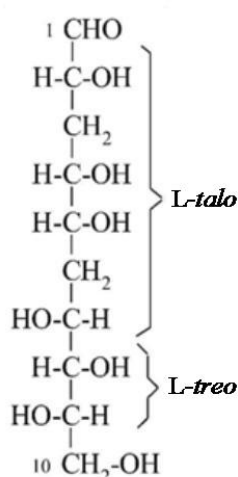
Przykład:



D-glicero-D-gluko-heptoza
 (nie D-gluko-D-glicero-heptoza)
 (2*R*,3*S*,4*R*,5*R*,6*R*)-2,3,4,5,6,7-heksahydroksoheptanal

P-102.5.1.1.3 Jeśli kolejne centra chiralności rozdzielone są centrami achiralnymi, to te ostatnie ignorujemy, a przedrostek (dla czterech lub mniej centrów) lub przedrostki konfiguracyjne (dla więcej niż czterech centrów) ustalamy dla zestawu centrów chiralności.

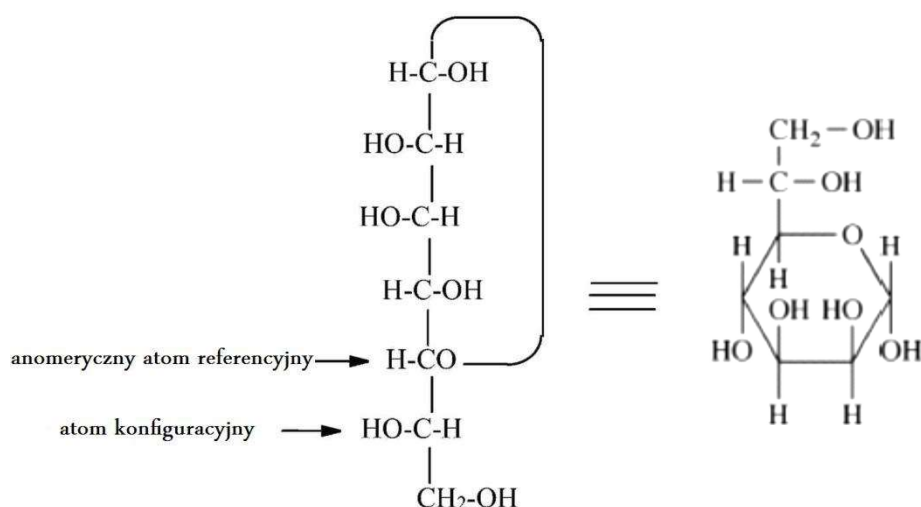
Przykład:



3,6-dideoksy-L-*treo*-L-*talo*-dekoza
 dla deoksycukrów patrz P-102.5.3)
 (2*R*,4*S*,5*R*,7*R*,8*S*,9*S*)-2,4,5,7,8,9,10-heptahydroksydekkanal

P-102.5.1.1.4 Formy cykliczne

Dla monosacharydów mających więcej niż sześć atomów węgla, anomerycznym centrum referencyjnym jest atom węgla o najwyższym lokancie w grupie centrów chiralności, sąsiadujący z centrum anomerycznym, zawartym w pierścieniu heterocyklicznym i oznaczonym jednym przedrostkiem konfiguracyjnym. Egzocykliczny atom tlenu centrum anomerycznego, w anomerze α , jest formalnie *cis*, w projekcji Fishera, względem atomu tlenu związanego z anomerycznym atomem referencyjnym; w anomerze β te atomy tlenu są formalnie *trans*.



L-glicero-α-D-manno-heptopiranoza
 (2*S*,3*S*,4*S*,5*S*,6*R*)-6-[(1*S*)-1,2-dihydroksyetylo]oksano-2,3,4,5-tetraol

P-102.5.2 Ketozy

P-102.5.2.1 Klasyfikacja

Ketozy klasyfikuje się jako 2-ketozy, 3-ketozy etc. zgodnie z najniższym lokantem pozycji (potencjalnej) grupy karbonylowej.

P-102.5.2.2 Nazwy zachowane

Zachowane nazwy i struktury są przedstawione w Tabeli 10.3; konfiguracja jest określona stereodeskryptorami 'D' lub 'L' zdefiniowanymi w P-102.2.

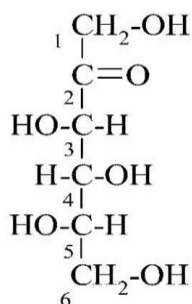
P-102.5.2.3 Systematyczne nazwy węglowodanowe

Systematyczne nazwy węglowodanowe ketoz zawierających od czterech do sześciu atomów węgla tworzy się z nazwy rdzeni oraz odpowiedniego przedrostka konfiguracyjnego wymienionego w Tabeli 10.3. Rdzenną nazwę tworzy się z nazwy rdzenia odpowiedniej aldozy zamieniając końcówkę 'oza' na 'uloza' poprzedzoną lokantem grupy karbonylowej, np.: pent-2-uloza i heks-3-uloza. Numerowanie łańcucha jest takie, aby grupa karbonylowa otrzymała najniższy z możliwych lokantów. Jeśli grupa karbonylowa jest w środku łańcucha o nieparzystej liczbie atomów węgla, to wyboru między alternatywnymi nazwami dokonuje się według P-102.4.

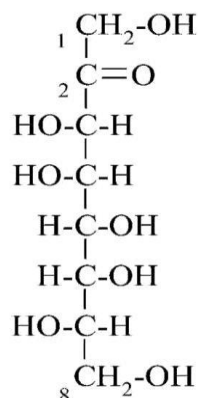
Przedrostki konfiguracyjne 2-ketoz przypisuje się tak samo jak w przypadku aldoz.

Poniżej nazwy podstawnikowe są podane po 'systematycznych nazwach węglowodanowych' w celu zilustrowania dwóch typów nazw systematycznych zalecanych w nomenklaturze węglowodanów.

Przykłady:



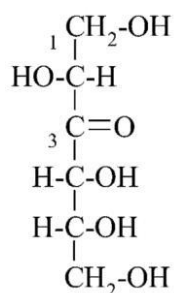
L-ksylo-heks-2-uloza
L-sorboza



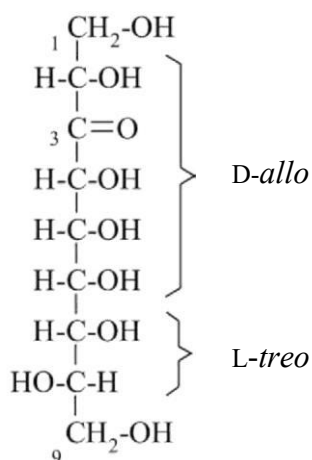
L-glicero-D-manno-okt-2-uloza
(3*S*,4*S*,5*R*,6*R*,7*S*)-1,3,4,5,6,7,8-heptahydroksyoktan-2-on

W przypadku ketoz z grupą karbonylową na C-3 lub na wyżej numerowanym atomie węgla grupę karbonylową pomija się, a zestawowi centrów chiralności daje się właściwy przedrostek lub przedrostki zgodnie z Tabelą 10.3.

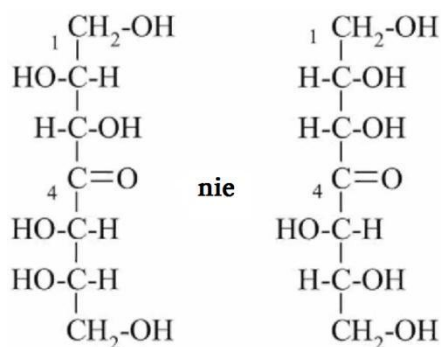
Przykłady:



D-arabino-heks-3-uloza
(2*R*,4*R*,5*R*)-1,2,4,5,6 -pentahydroksyheksan-3-on



L-treo-D-allo-non-3-uloza
(2*S*,4*R*,5*R*,6*R*,7*R*,8*S*)-1,2,4,5,6,7,8,9-oktahydroksynonan-3-on

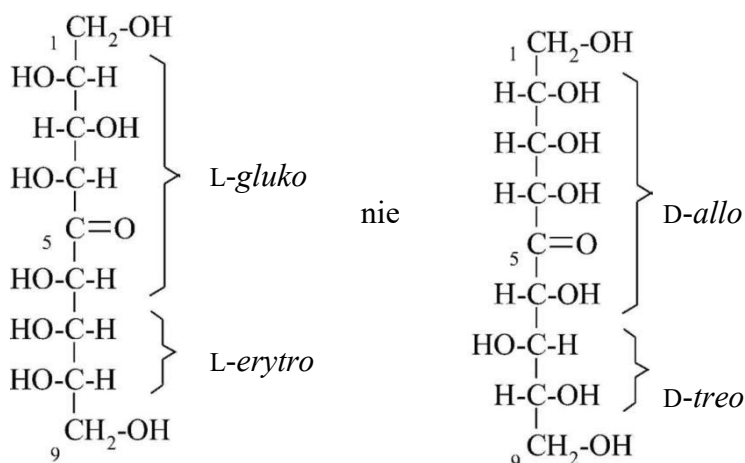


L-gluko-hept-4-uloza

(nie D-gulo-hept-4-uloza; *gluko* jest wcześniej w alfabetycznym porządku, patrz P-102.4(c))

(2*R*,3*S*,5*S*,6*S*)-1,2,3,5,6,7-heksahidroksyheptan-4-on

[nie (2*S*,3*S*,5*S*,6*R*)-1,2,3,5,6,7-heksahidroksyheptan-4-on; kiedy istnieje wybór to konfigurację *R* przypisuje się najniższemu lokantowi, patrz P-14.4(j)]



L-erytro-L-gluko-non-5-uloza

(nie D-treo-D-allo-non-5-uloza;

erytro-gluko jest wcześniej

w alfabetycznym porządku)

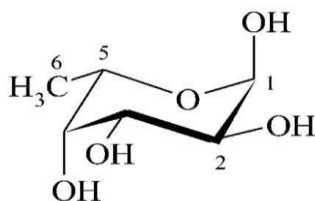
(2*R*,3*S*,4*R*,6*S*,7*S*,8*S*)-1,2,3,4,6,7,8,9-oktahidroksynonan-5-on

P-102.5.3 Deoksycukry

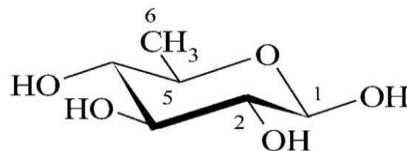
P-102.5.3.1 Przedrostek ‘deoksy’ określa usunięcie grupy ‘oksy’ (-O-), z ponownym przyłączeniem atomu wodoru. W tych zaleceniach przedrostek ‘deoksy’ klasyfikuje się jako rozłączny, a więc jest alfabetyzowany z innymi podstawnikami wynikającymi z nomenklatury podstawnikowej. To jest zmiana w odniesieniu do poprzednich zaleceń (patrz R-0.1.8.4, lit.2), która klasyfikowała przedrostek ‘deoksy’ pośród przedrostków nierozłącznych (zobacz również przedrostek ‘anhydro’, obecnie klasyfikowany jako rozłączny i alfabetyzowany z innymi rozłącznymi przedrostkami).

P-102.5.3.2 Nazwy zwyczajowe

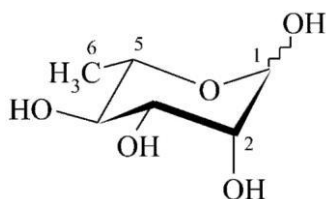
Zachowane są następujące nazwy: fukoza, chinowoza i ramnoza. Ich struktury przedstawiono poniżej w formach piranozowych.



α -L-fukopiranoza
6-deoksy- α -L-galaktopiranoza



β -D-chinowopiranoza
6-deoksy- β -D-glukopiranoza



L-ramnopiranoza
6-deoksy-L-mannopiranoza

P-102.5.3.3 Nazwy węglowodanów wywodzące się z nazw zachowanych

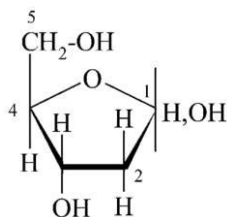
Przedrostek ‘deoksy’ stosuje się w kombinacji z zachowaną nazwą jeśli deoksygenacja nie narusza konfiguracji żadnego centrum chiralności, np.: 6-deoksy-D-alloza. Jednakże 6-deoksy pochodne glukozy, mannozy i galaktozy mają własne zachowane nazwy zwyczajowe (patrz P-102.5.3.2). Jeśli przedrostek ‘deoksy’ modyfikuje centrum chiralności, to w takich wypadkach preferowane jest nazwa węglowodanowa; stosowne są nazwy utworzone za pomocą nomenklatury podstawnikowej ze stereodeskryptorami CIP (przykłady: patrz P-102.5.3.4).

Dozwolone jest połączenie przedrostków ‘amino’ i ‘deoksy’ w tej samej pozycji (jak również przedrostków zawsze wymienianych jako przedrostki w nomenklaturze podstawnikowej jak opisane w P-59.1.9 i ‘deoksy’ w tej samej pozycji).

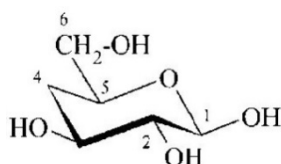
P-102.5.3.4 Nazwy systematyczne węglowodanów

Systematyczna nazwa węglowodanowa składa się z przedrostka ‘deoksy’ poprzedzonego lokantem, po których następuje nazwa rdzenia z takim przedrostkiem konfiguracyjnym, który opisuje konfiguracje centrów chiralności obecnych w deoksy związku. Przedrostki konfiguracyjne wymienia się kolejno, rozpoczynając od C-1. Zastosowanie przedrostka ‘deoksy’ z zachowanymi nazwami aldoz i ketoz nie jest zalecane.

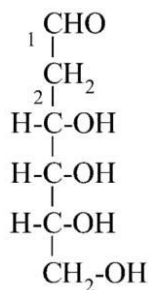
Przykłady:



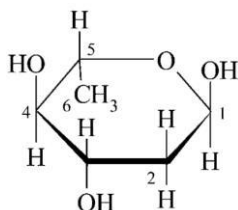
2-deoksy-D-*erythro*-pentofuranoza
(często określana jako 2-deoksyrybofuranoza
lub 2-deoksy-D-ryboza)
(2*ζ*,4*S*,5*R*)-5-(hydroksymetylo)oksolano-2,4-diol



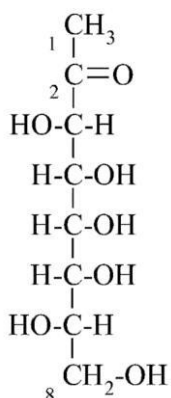
4-deoksy-β-D-*xyllo*-heksopiranoza
(nie 4-deoksy-β-D-galaktopiranoza)
(2*R*,3*R*,4*S*,6*S*)-6-(hydroksymetylo)oksano-2,3,4-triol



2-deoksy-D-*xylo*-heksoza
(nie 2-deoksy-D-alloza)
(3*S*,4*S*,5*R*)-3,4,5,6-tetrahydroksyheksanal



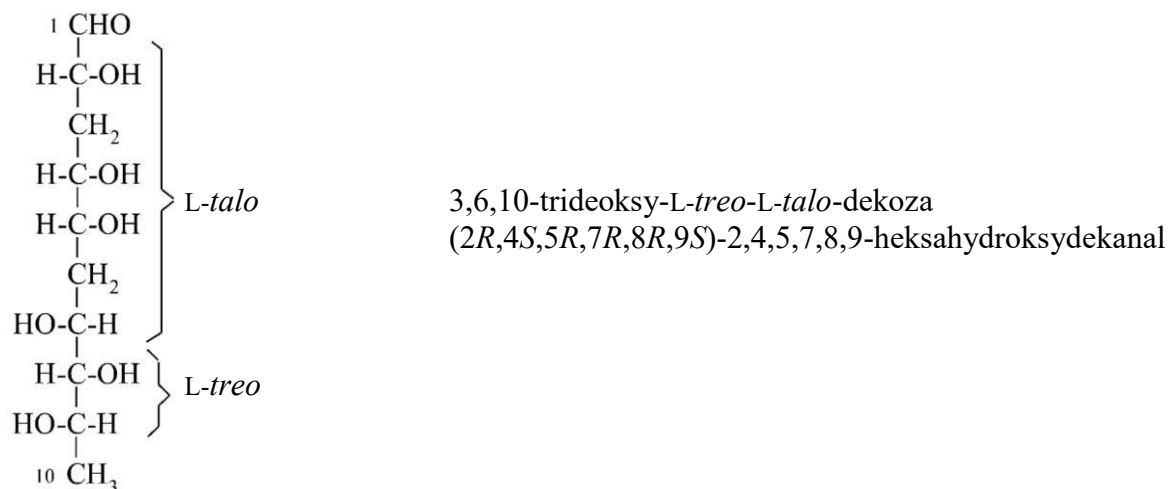
2,6-dideoksy-α-L-*arabino*-heksopiranoza
(2*R*,4*S*,5*R*,6*S*)-6-metylooksano-2,4,5-triol



1-deoksy-L-*glicero*-D-*altro*-okt-2-uloza
(3*S*,4*R*,5*R*,6*R*,7*S*)-3,4,5,6,7,8-heksahydroksyoktan-2-on

Jeśli grupa –CH₂– rozdziela centra chiralności na dwie serie, jest to pomijane w określaniu przedrostka konfiguracyjnego; przypisany przedrostek (lub przedrostki) musi objąć pełny zbiór centrów chiralności (patrz aldozy) (patrz P-102.5.1.1.3).

Przykład:



P-102.5.4 Aminocukry i tiocukry oraz inne analogi chalkogenowe

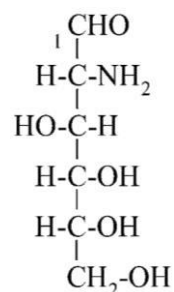
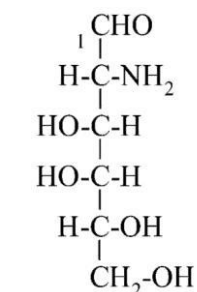
Zastąpienie grupy hydroksylowej monosacharydu lub pochodnej monosacharydu, nie będącej anomeryczną grupą hydroksylową, grupą aminową jest traktowane jako podstawienie właściwego atomu wodoru przez grupę aminową w odpowiednim deoksymonosacharydzie. Kofiguracja atomu węgla związanego z grupą aminową jest wyrażona tak jak dla aldoz, z potraktowaniem grupy aminowej jako odpowiednika grupy hydroksylowej.

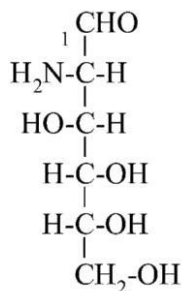
Przeciwnie, zastąpienie grupy hydroksylowej grupą sulfonylową jest traktowane jako zamiana funkcji i wskazuje się przedrostkiem 'tio'.

P-102.5.4.1 Aminocukry

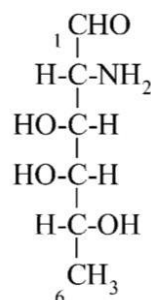
P-102.5.4.1.1 Nazwy zwyczajowe

Zachowane są następujące nazwy glikozyloamin:

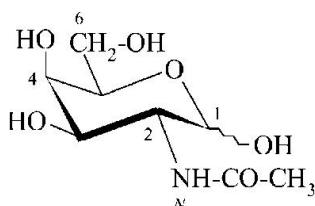




D-mannozamina
2-amino-2-deoksy-D-mannoza



D-fukozamina
2-amino-2,6-dideoksy-D-galaktoza

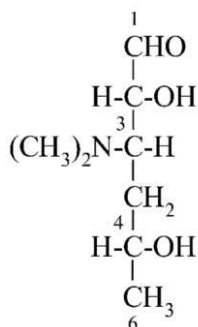


N-acetylo-D-galaktozoamina
2-acetamido-2-deoksy-D-galaktozopiranoza

P-102.5.4.1.2 Systematyczne nazwy węglowodanów

Systematyczne nazwy węglowodanów tworzy się dwuetapowo: w pierwszym etapie, w wyniku deoksygenacji na atomie węgla, powstaje deoksy cukier, na który w kolejnym etapie, w wyniku substytucji, winna być wprowadzona grupa aminowa. Nazwy podstawionych amin tworzy się używając podstawioną grupę aminową jako przedrostek.

Przykład:



3,4,6-trideoksy-3-(dimetyloamino)- *D*-ksylo-heksoza
(2*R*,3*S*,5*R*)-3-(dimetyloamino)-2,5-dihydroksyheksanal

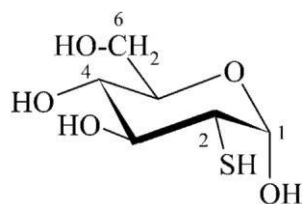
P-102.5.5 Tiocukry i inne chalkogenowe analogi

Zamianę atomu tlenu grupy hydroksylowej w aldozie lub ketozie czy atomu tlenu grupy karbonylowej łańcuchowej formy adozy lub ketozy na atom siarki, selenu lub teluru, wskazuje się umieszczając przedrostek, odpowiednio, 'tio', 'seleno' lub, 'teluro', poprzedzony właściwym lokantem, przed systematyczną lub zwyczajową nazwą aldozy lub ketozy. W nomenklaturze węglowodanów przedrostki 'tio', 'seleno', 'teluro' są traktowane jako rozłączne, a więc alfabetyzowane z innymi przedrostkami.

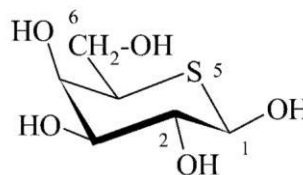
Zamianę pierścieniowego atomu tlenu cyklicznej formy aldozy lub ketozy na atom siarki, selenu lub telluru wskazuje się w ten sam sposób; jako lokantu używa się lokant sąsiedniego, nie anomerycznego atomu węgla. W takim przypadku nie zaleca się wyrażania zamiany szkieletu za pomocą przedrostków 'a' zamiany.

Sulfotlenki (i selenotlenki lub telurotlenki) oraz sulfony (i selenony lub tellurony) nazywa się nomenklaturą klasowo-funkcyjną (patrz P-63.6 nazwy klasowo-funkcyjne sulfotlenków i sulfonów).

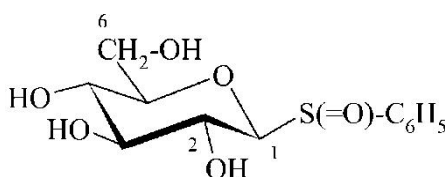
Przykłady:



2-tio- α -D-glukopiranoza



5-tio- β -D-galaktopiranoza



sulfoksyd β -D-glukopiranozyłu fenylu
(dla grup glikozyłowych patrz P-102.6.1.1)
(2*S*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-2-(benzenosulfinylo)-6-(hydroksymetylo)oksano-3,4,5-triol

P-102.5.6 Pochodne monosacharydów

P-102.5.6.1 *O*-podstawienie

P-102.5.6.2 Glikozydy

P-102.5.6.3 *C*-podstawienie

P-102.5.6.4 *N*-podstawienie

P-102.5.6.5 Alditole

P-102.5.6.6 Kwasy karboksylowe pochodne monosacharydów

P-102.5.6.7 Anhydrydy

P-102.5.6.1 *O*-podstawienie

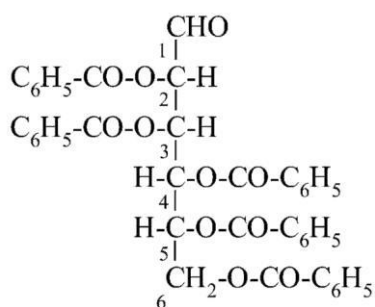
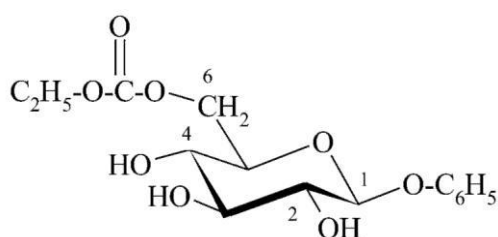
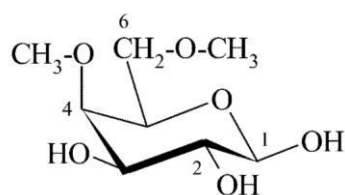
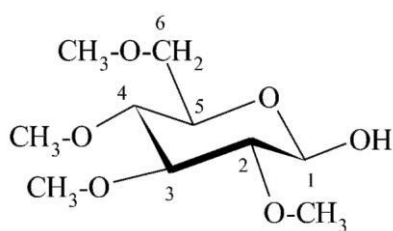
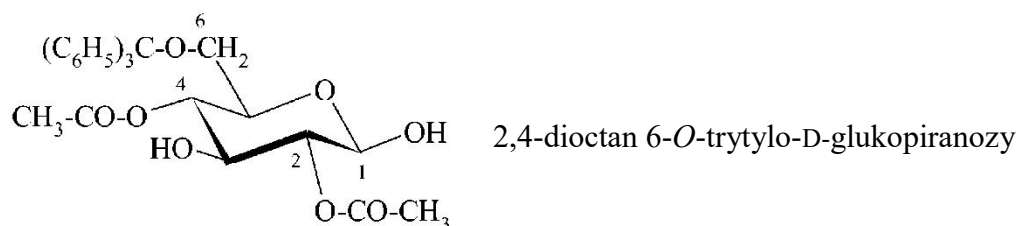
W celu zachowania integralności struktur i wykorzystania zachowanych nazw wskazujących absolutną konfigurację, *O*-podstawienie jest dopuszczalne w nomenklaturze węglowodanów.

Podstawniki zastępujące atom wodoru w alkoholowej grupie hydroksylowej cukru lub pochodnej cukru są określane jako *O*-podstawniki. Podstawienie anomerycznej grupy hydroksylowej jest omówione w P-102.5.6.3.2. Lokant '*O*-' nie jest powtarzany przy wielokrotnym podstawieniu tym samym atomem lub grupą. Jeśli trzeba stosuje się cyfrowe lokanty określające położenie podstawników; nie są one potrzebne przy pełnym podstawieniu przez identyczne grupy.

P-102.5.6.1.1 Pochodne *O*-acetylowe i *O*-alkilowe

Nazwy *O*-acylowych pochodnych, w których kwasowy komponent jest wymieniany jako osobne słowo z końcówką '*an/ian*' na początku, przed nazwą monosacharydu są preferowane względem nazw z przedrostkami *O*-acetylo, *O*-acylo. Jednak kiedy końcówka '*-oza*' jest zmieniona (np.: w celu wskazania glikozyłu lub funkcji kwasowej mających starszeństwo względem estru) to wymagany jest przedrostek *O*-acylo. Pochodne *O*-alkilowe zawsze określa się przedrostkami.

Przykłady:



P-102.5.6.1.2 Estry kwasu fosforowego

Estry cukrów z kwasem fosforowym są zwykle nazywane ‘fosforanami’. Termin ‘fosforan’ w biochemii wskazuje resztę fosforanową, niezależnie od stanu jonizacji i rodzaju przeciwjonu.

Jednakże nazwy systematyczne muszą odróżniać prawdziwy fosforan $\text{--O--PO(O}^-\text{)}_2$ od kwaśnego fosforanu, np. --O--PO(OH)_2 nazywanego ‘fosforan diwodoru’.

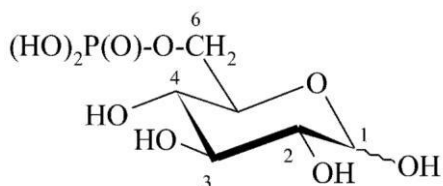
Przedrostki ‘fosfono’ dla --PO(OH)_2 i ‘fosfoniano’ dla $\text{--PO(O}^-\text{)}_2$ są także używane do wskazania pochodnych kwasu *O*-fosfonowego.

W nomenklaturze biochemicznej zamiast ‘fosfono’; i ‘fosfoniano’ używany jest termin ‘fosfo-’.

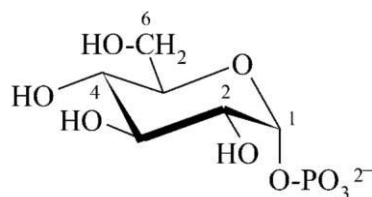
Jeśli cukier estryfikowany jest dwiema lub większą liczbą grup fosforanowych, to stosowane są numeryczne określenia ‘bis’, ‘tris’ i związek nazywa się ‘bis(fosforan)’, ‘tris(fosforan)’.

Terminologia dla fosfonianów jest analogiczna jak w przypadku fosforanów.

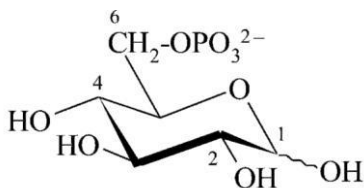
Przykłady:



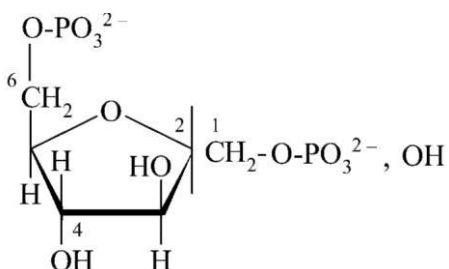
6-fosforan diwodoru D-glukopiranozy
6-O-fosfono-D-glukopiranoza



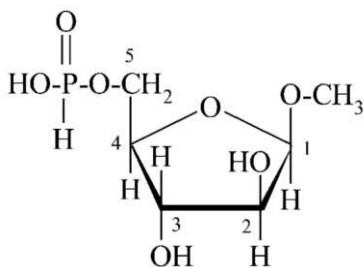
fosforan α -D-glukopiranozy
1-fosforan α -D-glukopiranozy



6-fosforan D-glukopiranozy
6-O-fosfoniano-D-glukopiranoza



1,6-bis(fosforan) D-fruktofuranozy
1,6-di-O-fosfoniano-D-fruktofuranaza

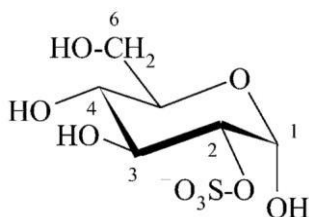


5-fosfonian wodoru (β -D-arabinofuranozydu metylu)
fosfonian wodoru 5-deoksy- β -D-arabinofuranozyd-5-ylu metylu

P-102.5.6.1.3 Estry kwasu siarkowego

Estry cukrów z kwasem siarkowym nazywa się dodając termin 'siarczan' z odpowiednim lokantem przed nazwą cukru. Dla określenia O-pochodnej można stosować przedrostki 'sulfo' dla grupy $\text{-SO}_3\text{H}$ oraz 'sulfoniano' dla grup SO_3^- .

Przykład:



2-siarczan α -D-glukopiranozy
2-O-sulfoniano- α -D-glukopiranoza

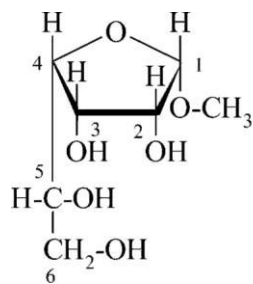
P-102.5.6.2 Glikozydy**P-102.5.6.2.1 Definicje**

Glikoza jest terminem rzadziej używanym niż monosacharyd. Glikozydy to mieszane acetale (ketale) pochodzące z cyklicznych form monosacharydów, w których anomeryczna grupa –OH została zastąpiona przez –OR. Patrz również lit. 25 gdzie dokładnie omówiono użycie terminu ‘glikozydy’.

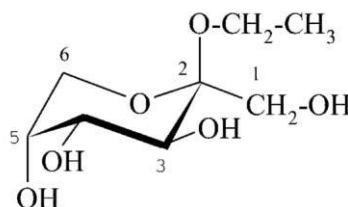
P-102.5.6.2.2 Nazwy

Glikozyd nazywa się nomenklaturą klasowo-funkcyjną. Nazwa klasy ‘glikozyd’ jest przystosowana do nazwy każdego cyklicznego monosacharydu przez zamianę końcowej litery ‘a’ na końcówkę ‘yd’ np. glukopiranoza na glukopiranozyd, fruktofuranoza na fruktofuranozyd. Nazwa klasy poprzedza nazwę, jako osobne słowo, podstawnika, który jest częścią grupy acetalowej lub ketalowej.

Przykłady:



α -D-gulofuranozyd metylu



β -D-fruktopiranozyd etylu

P-102.5.6.3 C-Podstawienie

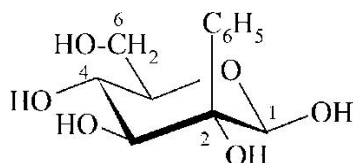
P-102.5.6.3.1 Podstawienie atomu wodoru na nie terminalnym atomie węgla P-102.5.6.3.2 Podstawienie z zamianą grupy hydroksylowej

P-102.5.6.3.3 Podstawienie na terminalnym atomie węgla

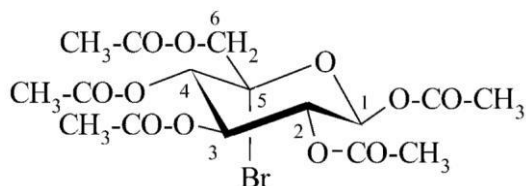
P-102.5.6.3.1 Podstawienie przy nie terminalnym atomie węgla

Podstawienie atomu wodoru na nieterminalnym atomie węgla prowadzi do C-podstawionego monosacharydu. W celu przypisania konfiguracji, grupę mającą pierwszeństwo według reguł pierwszeństwa CIP traktuje się jak równoważną grupie -OH. Każdej dwuznaczności (np. na atomie węgla, na którym utworzył się pierścień) można uniknąć stosując system *R/S* do przypisania konfiguracji zmodyfikowanemu centrum chiralności.

Przykłady:



2-C-fenyl- α -D-glukopiranoza
(2*R*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-6-(hydroksymetylo)-3-fenyloksano-2,3,4,5-tetraol



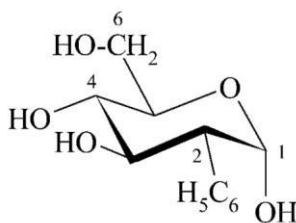
pentaoctan 5-C-bromo- β -D-glukopiranozy

tetraoctan (2*R*,3*R*,4*R*,5*S*,6*S*)-6-[(acetyloksy)metylo]-6-bromooksano-2,3,4,5-tetraylu

P-102.5.6.3.2 Podstawienie zastępujące nieterminalną grupę hydroksylową

Związek nazywa się jako podstawioną pochodną deoksycukru. Grupa zastępująca grupę -OH decyduje o przypisaniu konfiguracji. Każda potencjalna dwuznaczność powinna być eliminowana przez zastosowanie systemu *R/S*. System *R/S* powinien być stosowany w celu określenia konfiguracji w przypadku dwukrotnie podstawionych centrów chiralności; ta metoda jest preferowana względem określania konfiguracji przez przyjęcie, że podstawnik preferowany zgodnie z regułami pierwszeństwa CIP jest odpowiednikiem grupy -OH.

Przykłady:

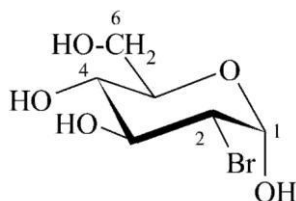


2-deoksy-2-fenyl- α -D-glukopiranoza

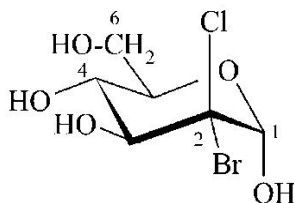
2-deoksy-2-C- fenyl- α -D-glukopiranoza (2*R*)-2-deoksy-

2- fenyl- α -D-*arabino*-heksopiranoza

(2*S*,3*R*,4*R*,5*S*,6*R*)-6-(hydroksymetylo)-3-fenylooksano-2,4,5-triol



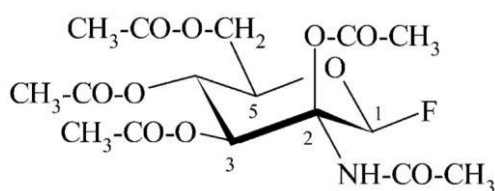
2-bromo-2-deoksy- α -D-glukopiranoza



(2*R*)-2-bromo-2-chloro-2-deoksy- α -D-*arabino*-heksopiranoza

2-bromo-2-chloro-2-deoksy- α -D-glukopiranoza

(2*S*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-3-bromo-3-chloro-6-(hydroksymetylo)oksano-2,4,5-triol

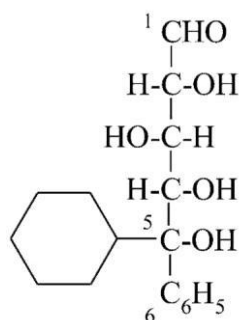


fluorek 2-*C*-acetamido-2,3,4,6-tetra-*O*-acetylo- α -D-mannopiranozylu
trioctan (2*S*,3*S*,4*S*,5*R*,6*R*)-3-acetamido-6-[(acetyloksy)metylo]-2-fluorooksano-3,4,5-triylu

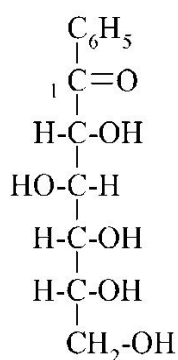
P-102.5.6.3.3 Podstawienie na terminalnym atomie węgla

Jeśli podstawienie na terminalnym atomie węgla węglowodanu tworzy nowe centrum chiralności, to jego konfiguracja powinna być określona przy zastosowaniu systemu *R/S*. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się nomenklaturą podstawnikową.

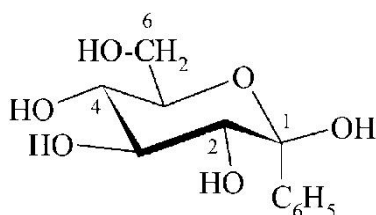
Przykłady:



(5*R*)-5-*C*-cykloheksylo-5-*C*-fenylo-D-ksyloza (2*R*,3*S*,4*S*,5*R*)-cykloheksylo-2,3,4,5-tetrahydroksy-5-fenylopentanal



1-*C*-fenylo-D-glukoza (2*R*,3*S*,4*R*,5*R*)-2,3,4,5,6-pentahydroksy-1-fenylheksan-1-on



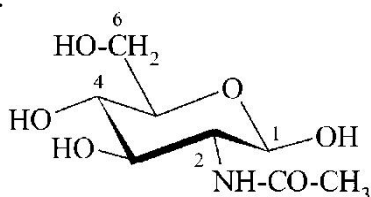
1-*C*-fenylo- β -D-glukopiranoza
(2*R*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-6-(hydroksymetylo)-2-fenylooksano-2,3,4,5-tetraol

P-102.5.6.4 *N*-podstawienie

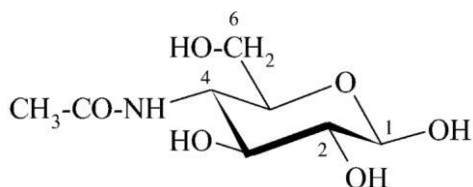
Podstawienie przy atomie azotu grupy -NH_2 aminocukru można traktować na dwa różne sposoby:

- (1) Cała podstawiona grupa aminowa może być wyrażona w przedrostku, np.: 2-acetamido (lub 2-butyloamino)-2-deoksy-D-glukoza.
- (2) Jeśli aminocukier ma nazwę zwyczajową, to podstawienie wskazuje się przedrostkiem poprzedzanym przez, pisaną kursywą, wielką literą *N*.

Przykłady:



2-acetamido-2-deoksy- β -D-glukopiranoza
N-acetylo- β -D-glukozamina



4-acetamido-4-deoksy- β -D-glukopiranoza

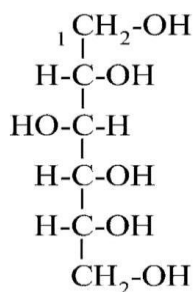
P-102.5.6.5 Alditole

Alditole nazywa się zmieniając końcówki ‘-oza’ w nazwie odpowiedniej aldozy na ‘-itol’.

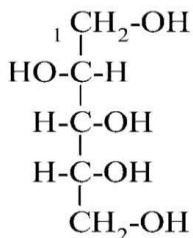
P-102.5.6.5.1 Wybór struktury macierzystej

Jeśli ten sam alditol może się wywodzić z dwóch różnych aldoz lub aldozy oraz ketozy, to zalecaną strukturę wskazuje reguła P-102.4. Wyjątkiem są zachowane nazwy fukitol i ramnitol dopuszczalne dla alditoli odpowiadających 6-deoksycukrom: fukozie i ramnozie.

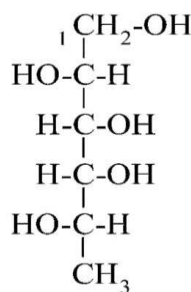
Przykłady:



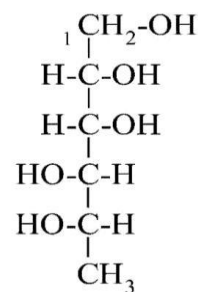
D-glucitol
(nie L-gulitol)



D-arabinitol
(nie D-likситol)



L-fukitol
1-deoksy-D-galaktitol

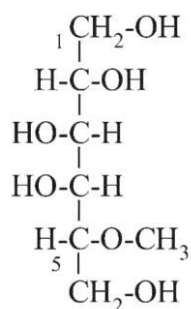


L-ramnitol
1-deoksy-L-mannitol

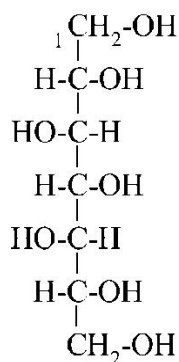
P-102.5.6.5.2 Formy *mezo*

Przedrostek '*mezo*-' musi być dołączony do preferowanych nazw: erytrytol, galaktitol i rybitol. Stereodeskryptor 'D' lub 'L' trzeba podać, gdy pochodna izomeru *mezo* staje się asymetryczna w wyniku podstawienia. Stereodeskryptor 'D' lub 'L' należy dodać również wtedy, jeśli występują więcej niż cztery następujące po sobie centra chiralności.

Przykłady:



5-*O*-metylo- D-galaktitol
(konfiguracja 'D' jest starsza od 'L' patrz P-102.4)



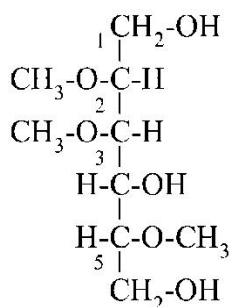
ezo-D-*glicero*-L-*ido*-heptitol
(konfiguracja 'D' jest starsza od 'L' patrz P-102.4)
(2*R*,3*S*,4*r*,5*R*,6*S*)-heptano-1,2,3,4,5,6,7-heptaol

P-102.5.6.5.3 Wybór macierzystej struktury dla podstawionych alditoli

Macierzysta struktura musi zawierać:

- (a) najniższe lokanty dla przedrostków podstawników zgodnie z kryterium (e) w regule P-102.4.

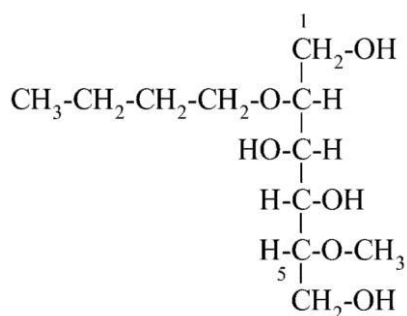
Przykład:



2,3,5-tri-*O*-metylo-D-mannitol
(nie 2,4,5-tri-*O*-metylo-D-mannitol)

- (b) najniższy lokant dla podstawnika wymienianego jako pierwszy w porządku alfabetycznym, zgodnie z kryterium (f) w regule P-102.4.

Przykład:

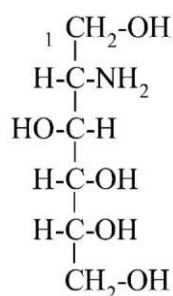


2-*O*-butylo-5-*O*-metylo-D-mannitol
(nie 5-*O*-butylo-2-*O*-metylo-D-mannitol)

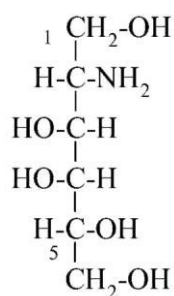
P-102.5.6.5.4 Aminoalditole

Alditole wywodzące się z galaktozoaminy i glukozoaminy to aminoalditole. Mają zachowane nazwy, odpowiednio, galaktozoaminitol i glukozoaminitol.

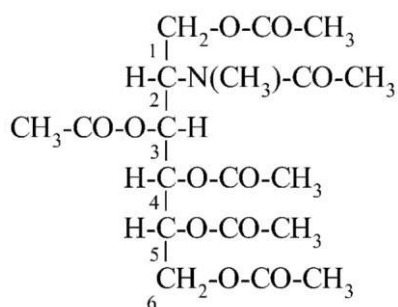
Przykłady:



D-glukozoaminitol
2-amino-2-deoksy-D-glukitol



D-galaktozoaminitol
2-amino-2-deoksy-D-galaktitol



1,3,4,5,6-pentaoctan 2-deoksy-2-(*N*-metyloacetamido)- D-glucitolu

P-102.5.6.6 Kwasy karboksylowe monosacharydów

P-102.5.6.6.1 Klasyfikacja

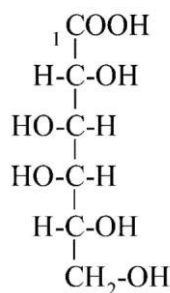
P-102.5.6.6.2 Kwasy aldonowe. Kwasy monokarboksylowe formalnie powstające z aldoz w wyniku utlenienia grupy aldehydowej do grupy karboksylowej nazywa się kwasami aldonowymi.

- P-102.5.6.6.3 Kwasy ketoaldonowe. Kwasy oksokarboksylowe formalnie powstające z kwasów aldonowych przez utlenienie drugorzędowej grupy $>\text{CHOH}$ do grupy karbonylowej nazywa się kwasami ketoaldonowymi.
- P-102.5.6.6.4 Kwasy uronowe. Kwasy monokarboksylowe formalnie powstające z aldoz przez utlenienie terminalnej grupy $-\text{CH}_2\text{OH}$ do grupy karboksylowej nazywa się kwasami uronowymi.
- P-102.5.6.6.5 Kwasy aldarowe. Kwasy dikarboksylowe tworzone z aldoz przez utlenienie obu grup końcowych ($-\text{CHO}$ i $-\text{CH}_2\text{OH}$) do grup karboksylowych nazywa się kwasami aldarowymi.

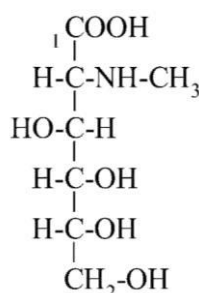
P-102.5.6.6.2 Kwasy aldonowe

Kwasy aldonowe dzielą się na aldotrionowe, aldotetronowe, aldopentonowe, aldoheksanowe itd., zależnie od liczby atomów węgla w łańcuchu. Nazwy poszczególnych związków tworzy się zastępując końcówkę 'oza' w zachowanej lub systematycznej nazwie aldozy na końcówkę 'onowy' i poprzedzając nazwę słowem 'kwas'. Lokant 1 jest przypisany do atomu węgla grupy karboksylowej.

Przykłady:



kwas D-galaktonowy

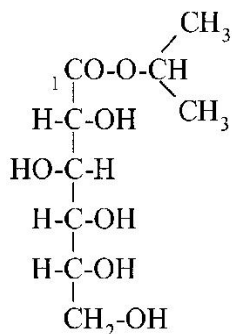


kwas 2-deoksy-2-(metyloamino)-D-glukonowy

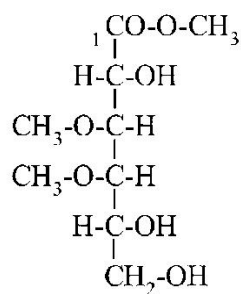
P-102.5.6.6.2.1 Pochodne kwasów aldonowych

Kwasy aldonowe traktuje się jako kwasy karboksylowe mające zachowaną nazwę. Mogą tworzyć sole, estry, bezwodniki, grupy acylowe, halogenki i pseudohalogenki kwasowe, amidy, hydrazydy, nityle i chalkogenowe analogi, jak opisano w P-65 i P-66 dotyczących systematycznej nomenklatury.

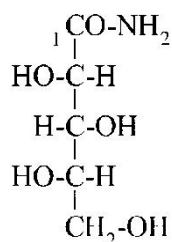
Przykłady:



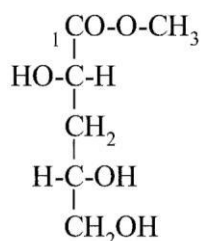
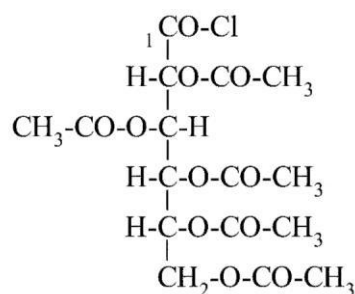
D-glukonian propan-2-ylu



3,4-di-O-metylo-D-galaktonian metylu

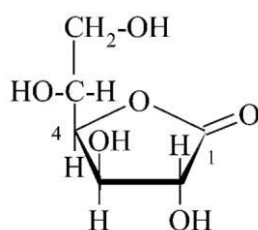


L-ksylonoamid

3-deoksy-D-*treo*-pentonian metyluchlorek penta-*O*-acetylo-D-glukonoilu

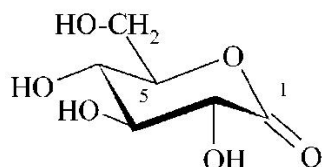
P-102.5.6.6.2.2 Laktony i laktamy nazywa się zgodnie z regułami, odpowiednio, P-65.6.3.5.1 i P-66.1.4.1. Przed terminem ‘lakton’ lub ‘laktam’ występują dwa lokanty: pierwszy jest lokantem określającym pozycję grupy karboksy, a drugi lokant wskazuje pozycję przyłączenia do węglowego łańcucha. Do nazwania laktamów grupa aminowa, -NH₂ musi być wytworzona i wymieniona. Nie zaleca się używanie greckich liter do określenia rozmiarów pierścienia laktonu lub laktamu. Nazwy mogą być również tworzone podstawnikowo na bazie pierścieni heterocyklicznych zgodnie z regułami opisanymi w rozdziałach P-1 do P-9.

Przykłady:



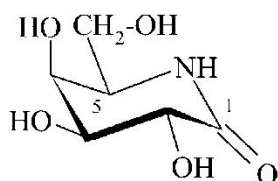
D-glukono-1,4-lakton

(3*R*,4*R*,5*R*)-[(1*R*)-1,2-dihydroksyetylo]-3,4-dihydroksyoksolan-2-on



D-glukono-1,5-lakton

(3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-3,4,5-trihydroksy-6-(hydroksymetylo)oksan-2-on



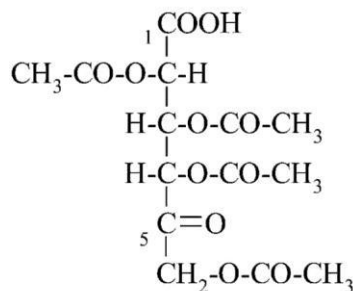
5-amino-5-deoksy-D-galaktono-1,5-laktam

(3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-3,4,5-trihydroksy-6-(hydroksymetylo)piperydyn-2-on

P-102.5.6.6.3 Kwasy ketoaldonowe

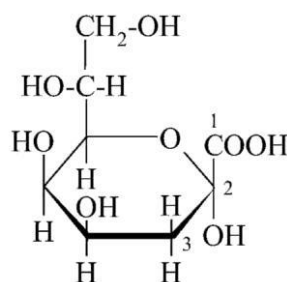
P-102.5.6.6.3.1 Nazwy poszczególnych kwasów ketoaldonowych tworzy się zastępując końcówkę ‘uloza’ odpowiedniej ketozy końcówką ‘ulozonowy’, poprzedzoną przez lokant grupy ketonowej. Numeracja rozpoczyna się od węgla grupy karboksylowej.

Przykłady:



kwasy 2,3,4,6-tetra-*O*-acetylo-D-arabino-heks-5-ulozonowy

kwasy (2*S*,3*R*,4*S*)-2,3,4,6-tetrakis(acetyloksy)-5-oksoheksanowy



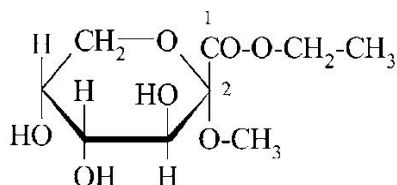
kwasy 3-deoksy- α -D-*manno*-okt-2-ulopiranozowy

kwasy (2*R*,4*R*,5*R*,6*R*)-6-[(1*R*)-1,2-dihydroksyetylo]

-2,4,5-trihydroksyoksano-2-karboksylowy

P-102.5.6.6.3.2 Glikozydy kwasów ketoaldonowych nazywa się zamieniając w nazwie składnika ‘piranoza’ na ‘piranozyd’ co daje ‘kwasy –ulopiranozydonowy’. Nazwy pochodnych kwasów ketoaldonowych tworzy się analogicznie jak opisano w rozdziale P-102.5.6.6.2 dla kwasów aldoniczych. Kiedy glikozyd jest zestryfikowany, glikozydową część nazwy ujmuje się w nawias.

Przykład:



(α -D-fruktopiranozyd metylu)onian etylu (PIN)

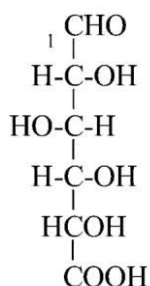
(α -D-*arabino*-heks-2-ulopiranozyd metylu)onian etylu

(2*R*,3*S*,4*R*,5*R*)-3,4,5-trihydroksy-2-metoksyoksano-2-karboksylan etylu

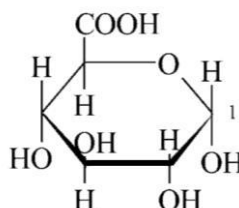
P-102.5.6.6.4 Kwasy uronowe

P-102.5.6.6.4.1 Nazwy poszczególnych kwasów uronowych tworzy się zastępując końcówkę 'za' w zachowanej lub systematycznej nazwie odpowiedniej aldozy końcówką '-uronowy' i dodając na początku nazwy osobne słowo 'kwas'. Numeracja aldozy pozostaje niezmienną; lokant '1' jest w dalszym ciągu przypisany do grupy (potencjalnie) aldehydowej.

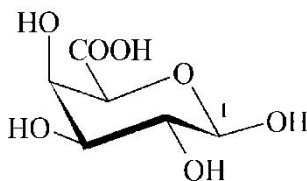
Przykłady:



kwas D-glukouronowy



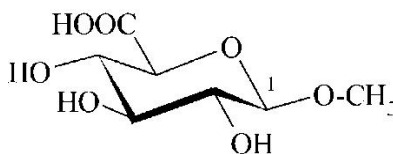
kwas α -D-glukopiranouronowy



kwas β -D-galaktopiranouronowy

P-102.5.6.6.4.2 Nazwy glikozydów kwasów uronowych tworzy się zastępując składnik 'piran' w nazwie kwasu na 'piranozyd'.

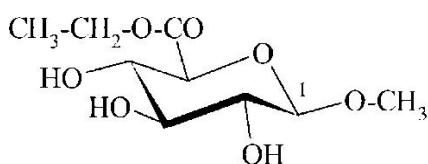
Przykład:



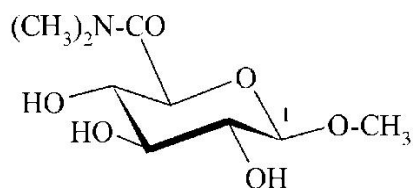
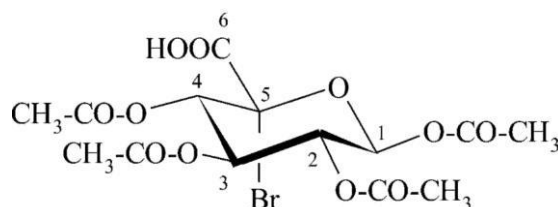
kwas (β -D-glukopiranozyd metylu)uronowy

P-102.5.6.6.4.3 Pochodne kwasów uronowych nazywa się zgodnie z wytycznymi przedstawionymi P-102, P-65 i P-66.

Przykłady:



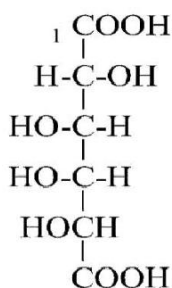
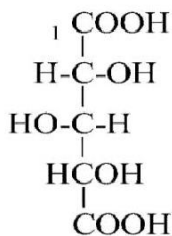
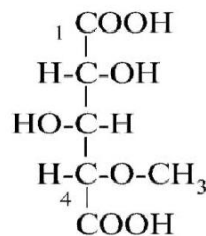
(β -D-glukopiranozyd metylu)uronian etylu

*N,N*-dimetylo((β-D-glukopiranozyd metylu)uronoamidkwas (5*R*)-1,2,3,4-tetra-*O*-acetylo-5-*C*-bromo-α-D-ksylo-heksapiranouronowykwas (2*R*,3*S*,4*R*,5*R*,6*R*)-3,4,5,6-tetrakis(acetoksy)-2-bromooksano-2-karboksylowy**P-102.5.6.6.5** Kwasy aldarowe

P-102.5.6.6.5.1 Nazwy poszczególnych kwasów aldarowych tworzy się zastępując końcówkę ‘oza’ w nazwie macierzystej aldozy końcówką ‘arowy’, i umieszczając na początku nazwy słowo ‘kwas’. Wybór struktury macierzystej opiera się na regułach omówionych w P-102.4 i P-102.5.6.5.1.

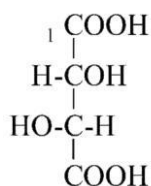
Do nazw kwasów aldarowych, które są symetryczne i z tego powodu nie mają przedrostków D lub L, dla jasności należy dodać stereodeskryptor ‘*mezo*’. Należy jednak dodać przedrostek D lub L, gdy kwas *mezo*-aldarowy staje się asymetryczny w wyniku podstawienia.

Przykłady:

kwas L-altrarowy
(nie L-talarowy)kwas *mezo*-ksylarowykwas 4-*O*-metylo-D-ksylarow
(nie 2-*O*-metylo-ksylarowy)

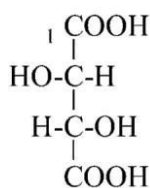
P-102.5.6.6.5.2 Kwas winowy jest nazwą zwyczajową kwasów aldarowych, odpowiadających macierzystym aldozom, erytrozie i treozie. Konfiguracje kwasu winowego podaje się w systemie ‘*R*’ i ‘*S*’. Sole estry nazywa się winianami.

Przykłady:

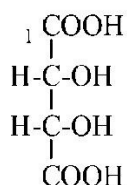
kwas (2*R*,3*R*)-2,3-dihydroksybutanodiowykwas (2*R*,3*R*)-winowy

kwas L-trearowy

kwas (+)-winowy



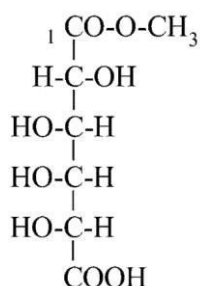
kwask (2*S*,3*S*)-2,3-dihydroksybutanodiowy kwas (2*S*,3*S*)-winowy
 kwas D-trearrowy kwas (-)-winowy



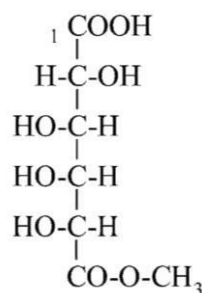
kwask (2*R*,3*S*)-2,3-dihydroksybutanodiowy
 kwas (2*R*,3*S*)-winowy
 kwas erytrarowy
 kwas *mezo*-winowy

P-102.5.6.6.5.3 Pochodne kwasów aldarowych otrzymane przez modyfikację grupy karboksylowej (estry, amidy, hydrazydy, nityle, kwasy amowe, etc.) nazywa się zgodnie z zasadami przedstawionymi w P-102.5.6.6.2 i P-66.

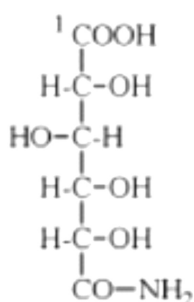
Przykłady:



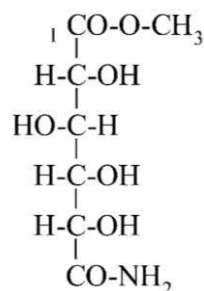
L-altraran wodoru 1-metylu



L-altraran wodoru 6-metylu



kwask D-glukar-6-amowy
 kwas 6-amino-6-deoksy-6-okso-D-glukonowy



D-glukar-6-amian metylu
 6-amino-6-deoksy-6-okso-glukonian metylu

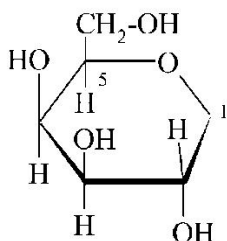
P-102.5.6.7 Anhydrydy

Anhydrydy są to inter- (wewnątrz-) i intramolekularne (międzycząsteczkowe) pochodne monosacharydów.

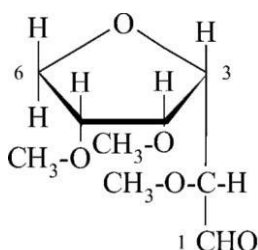
P-102.5.6.7.1 Intramolekularne anhydrydy.

Wewnątrzcząsteczkowe etery (potocznie nazywane wewnątrzcząsteczkowymi bezwodnikami), formalnie powstają przez eliminację wody z dwóch grup hydroksylowych jednej cząsteczki monosacharydu (aldozy lub ketozy) lub pochodnej monosacharydu. Związki te nazywa się dodając do nazwy monosacharydu rozłączny przedrostek ‘anhydro’ poprzedzony parą lokantów wskazujących dwie grupy hydroksylowe.

Przykłady:



1,5-anhydro-D-galaktitol
(2*R*,3*R*,4*R*,5*S*)-2-(hydroksymetylo)oksano-3,4,5-triol

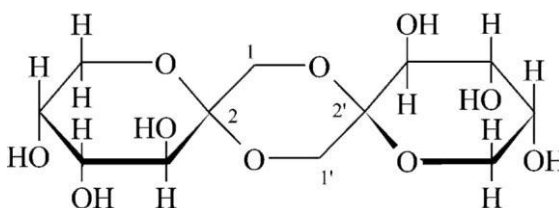


3,6-anhydro-2,4,5-tri-*O*-metylo-D-glukoza
(2*R*)-2-[(2*S*,3*R*,4*R*)-3,4-dimetoksyoksolan-2-ylo]-2-metoksyacetaldehyd

P-102.5.6.7.2 Intermolekularne anhydrydy

Cykliczne produkty kondensacji dwóch cząsteczek monosacharydów z wydzieleniem dwóch cząsteczek wody (zwykle nazywane bezwodnikami międzycząsteczkowymi) nazywa się, umieszczając termin ‘dianhydryd’ przed nazwami dwóch macierzystych monosacharydów. Jeśli monosacharydy są różne, to jako pierwszy wymienia się starszy według kryteriów wyboru macierzystej struktury (patrz P-102.4). Położenie każdego wiązania bezwodnikowego wskazuje się parą lokantów wskazujących położenie uczestniczących grup; lokanty odnoszące się do jednego z monosacharydów (w mieszanych bezwodnikach wymieniane jako drugie) są primowane. Obie pary lokantów bezpośrednio poprzedzają termin ‘dianhydryd’.

Przykład:



1,2':1',2-dianhydryd α -D-fruktopiranozy β -D-fruktopiranozy

[α -D-fruktopiranoza jest wymieniana jako pierwsza zgodnie z P-102.4©, α poprzedza β]
(3*R*,4*R*,5*S*,6*R*,9*S*,12*R*,13*R*,14*S*)-1,7,10,15-tetraoksadispiro[5.2.5⁹.2⁶]heksadekano-3,4,5,12,13,14-heksaol

P-102.6 MONOSACHARYDY I ICH POCHODNE JAKO PODSTAWNIKI

P-102.6.1 Grupy glikozylowe

P-102.6.2 Podstawniki inne niż grupy glikozylowe

P-102.6.1 Grupy glikozylowe

P-102.6.1.1 Grupy glikozylowe

P-102.6.1.2 Związki *O*-glikozyloweP-102.6.1.3 Związki *N*-glikozylowe (glikozyloaminy)P-102.6.1.4 Związki *C*-glikozylowe

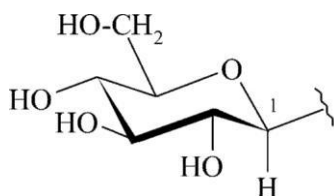
P-102.6.1.5 Halogenki, pseudohalogenki i estry glikozylowe

P-102.6.1.1 Grupy glikozylowe

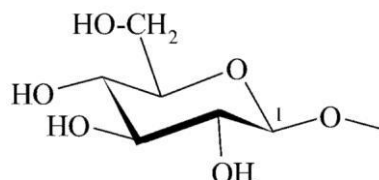
P-102.6.1.1.1 Podstawniki powstające w wyniku usunięcia anomerycznej grupy hydroksylowej z cyklicznych monosacharydów nazywa się zastępując końcową literę 'a' w nazwie monosacharydu przez 'yl'. W nomenklaturze węglowodanów stosuje się termin 'reszta glikozylowa'. Terminy tego typu są szeroko stosowane w nazywaniu glikozydów, jeśli nie są one strukturami macierzystymi, oraz oligosacharydów.

Do nazwy podstawnika powstałego przez usunięcie grupy hydroksylowej z pozycji anomerycznej nie dodajemy lokantu wskazującego pozycję wolnej walencyjności. W nomenklaturze systematycznej zaleca się stosowanie falistej linii w celu zaznaczenia wolnej wartościowości w cyklicznym podstawniku.

Przykłady:



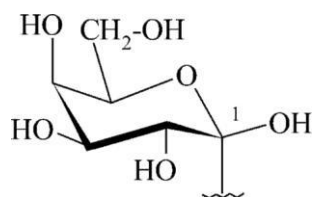
β -D-glukopiranozyl
(pokazany jest atom wodoru w pozycji 1)



β -D-glukopiranozyluksy

P-102.6.1.1.2 Kiedy wolna walencyjność jest tworzona poprzez utratę atomu wodoru na węglu '1' podstawnik nazywa się jako grupę glikozylową, a obecność grupy hydroksylowej wskazuje się przez podstawienie na węglu '1'. W takim przypadku stereodeskryptory ' α ' lub ' β ' odnoszą się do wolnej walencyjności a nie do grupy hydroksylowej.

Przykład:

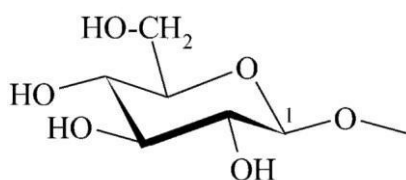


1-hydroksy- α -D-galaktopiranozyl

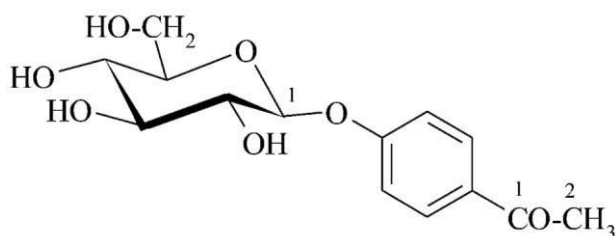
P-102.6.1.2 Związki *O*-glikozyłowe

Podstawnik utworzone w wyniku usunięcia atomu wodoru z anomerycznej grupy -OH traktuje się jako zespolony podstawnik powstały z grupy 'glikozyl' i grupy 'oksy'. W poniższych przykładach nazwy związków tworzy się z zastosowaniem starszeństwa klas do ustalenia głównej grupy charakterystycznej i przypisania jej monosacharydowemu lub aglikonowemu składnikowi.

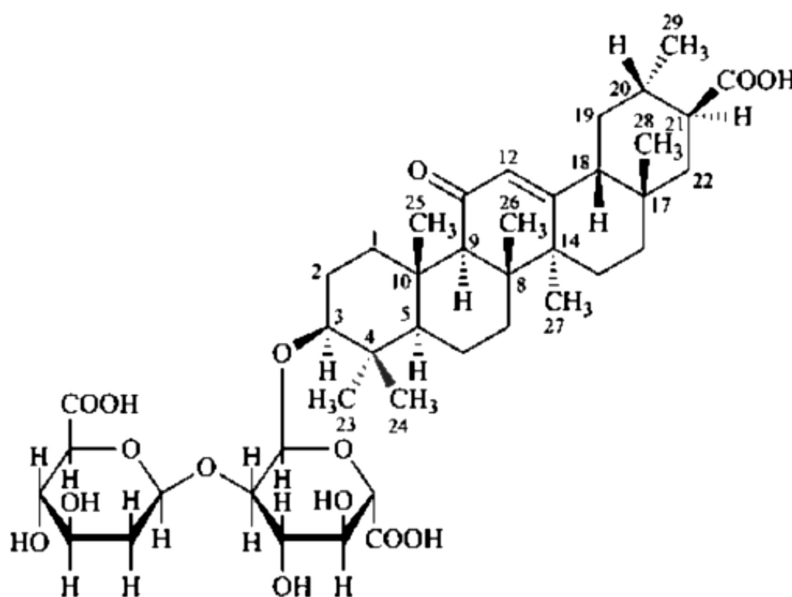
Przykłady:



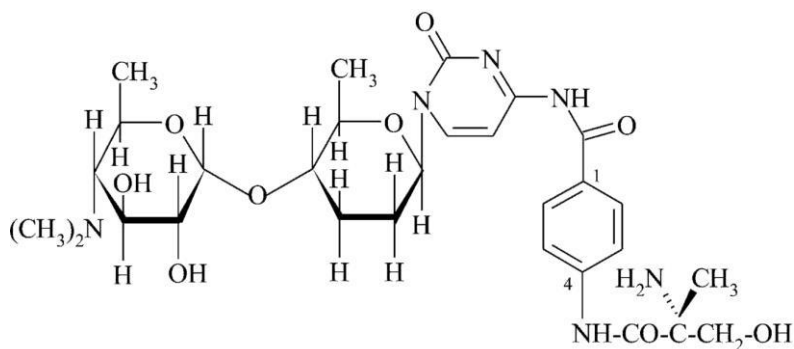
β-D-glukopiranozyloksy



1-[4-(β-D-glukopiranozyloksy)fenylo]etan-1-on
nie 4'-(β-D-glukopiranozyloksy)acetofenon;
acetofenon nie może być podstawiony (patrz P-64.2.2.1)
(również nie β-D-glukopiranozyd 4-acetylofenylu;
keton jest starszy od związku hydroksylowego)



kwas 21β-karboksy-11-okso-30-norolean-12-en-3β-ylo(kwas
2-*O*-β-D-glukopiranozylouronowy)-α-D-glukopirazydouronowy



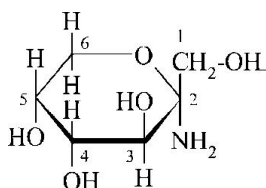
4-[(2*R*)-2-amino-3-hydroksy-2-metylopropanoamido]-*N*-{1-[(2*R*,5*S*,6*R*)-5-{[4,6-dideoksy-4-(dimetyloamino)-α-D-glukopiranozylo]oksy}-6-metyloksan-2-ylo]-2-okso-1,2-dihidropirymidyn-4-ylo}benzamid

Wytlumaczenie: główną funkcją jest amid; cykliczny amid, benzamid jest starszy od acyklicznego propanoamidu.

P-102.6.1.3 Związki *N*-glikozyłowe (glikozyloaminy)

Pochodne *N*-glikozyłowe nazywane są glikozyloaminami.

Przykład:

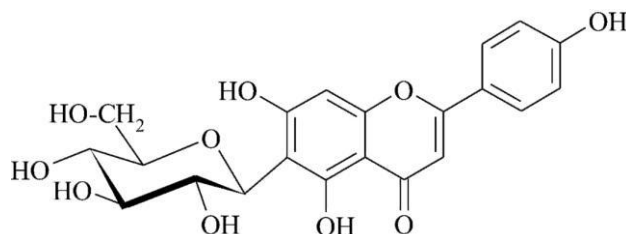


α-D-fruktopiranozoiloamina

P-102.6.1.4 Związki *C*-glikozyłowe

Związki, formalnie powstające przez eliminację cząsteczki wody utworzonej z glikozydowej (anomerycznej) grupy hydroksylowej i atomu wodoru związanego z atomem węgla (co prowadzi do utworzenia wiązania C-C), nazywa się stosując nazwę odpowiedniej grupy glikozyłowej.

Przykład:



6-(β-D-glukopiranozylo)-5,7-dihydroksy-2-(4-hydroksyfenylo)-4*H*-chromen-4-on

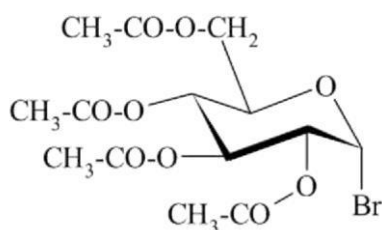
6-(β-D-glukopiranozylo)-5,7-dihydroksy-2-(4-hydroksyfenylo)-4*H*-1-benzopiran-4-on

6-(β-D-glukopiranozylo)-4',5,7-dihydroksyflawon

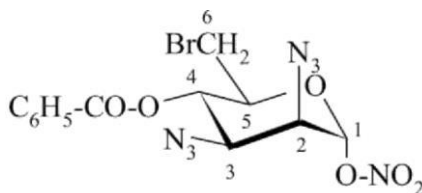
P-102.6.1.5 Halogenki, pseudohalogenki i estry glikozyłowe

Nazwy halogenków i pseudohalogenków glikozyłowych tworzy się stosując nomenklaturę klasowo-funkcyjną, czyli pododaje się nazwę klasy np.: chlorek, izocyjanian itp., zapisując ją jako oddzielny wyraz przed nazwą właściwej grupy glikozyłowej. Estry oksokwasów w pozycji 1 traktuje się w sposób opisany dla estrów w innych pozycjach (patrz P-102.5.6.1).

Przykłady:



bromek 2,3,4,6-tetra-*O*-acetylo- α -D-glukopiranozyłu

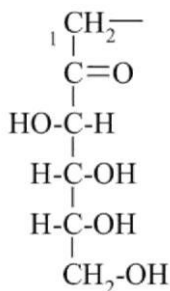


1-azotan 4-benzoesan 2,3-diazydo-6-bromo-2,3,6-trideoxy- α -D-mannopiranozy

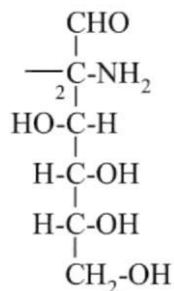
P-102.6.2 Podstawniki inne niż grupy glikozyłowe

Atom wodoru może być usunięty z każdej pozycji w monosacharydzie innej niż C-1. Takie utworzenie wolnej walencyjności zaznacza się przyrostkiem 'yl', poprzedzonym odpowiednim lokantem wskazującym pozycję wolnej walencyjności i odróżnienia od podstawnika glikozyłowego, dla którego pomija się lokant '1'. Takie przyrostki tworzy się zastępując literę 'a' w systematycznej lub zwyczajowej nazwie monosacharydu końcówką *n*-C-yl, *n*-O-yl. Symbol 'C' pomija się wtedy, gdy wolna walencyjność jest tworzona na atomie węgla do którego przyłączone są tylko atomy wodoru.

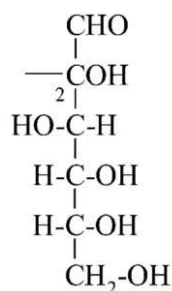
Przykłady:



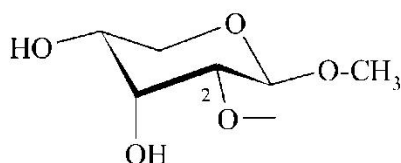
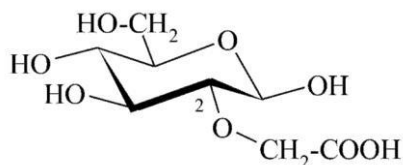
1-deoksy-D-fruktoz-1-yl



2-amino-2-deoksy-D-glukoz-2-C-yl



D-glukoz-2-C-yl

 β -D-rybopiranozyd-2-O-yl metylukwas (β -D-glukopiranozyl-2-O-ylo)octowy

(nie 2-O-(karboksymetylo)- β -D-glukopiranoza; ta nazwa jest niezgodna z wymogami opisanymi w P-102.6.1.2; kwas karboksylowy jest starszy od związku hydroksylowego)

P-102.7 DISACHARYDY I OLIGOSACHARYDY

Nazwy disacharydów i oligosacharydów tworzy się według reguł i konwencji opisanych wcześniej dla monosacharydów.

P-102.7.1 Disacharydy

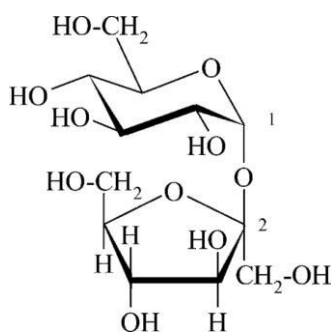
P-102.7.2 Oligosacharydy

P-102.7.1 Disacharydy

P-102.7.1.1 Disacharydy bez wolnej grupy hemiacetalowej

Disacharydy utworzone w wyniku eliminacji cząsteczki wody z dwóch anomerycznych grup hydroksylowych, nazywane są glikozyloglikozydami. Macierzysta struktura (cytowana jako 'glikozyd') jest wybrana zgodnie z kryteriami opisanymi w P-102.4. Oba anomeryczne deskryptory muszą być wymienione w nazwie.

Przykład:



α -D-glukopiranozyd β -D-fruktofuranozylu
(nie β -D-fruktofuranozyl α -D-glukopiranozylu, frukto wyprzedza gluko w kolejności alfabetycznej) sacharoza (nazwa zwyczajowa)

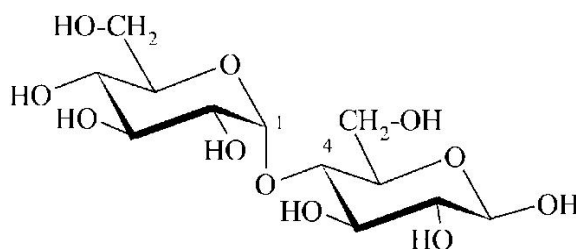
P-102.7.1.2 Disacharydy z wolną grupą hemiacetalową

Disacharydy powstające w wyniku eliminacji jednej cząsteczki wody z jednej glikozydowej (anomerycznej) grupy hydroksylowej i jednej alkoholowej grupy hydroksylowej nazywa się glikozyloglikozami. W pełnej nazwie lokanty i deskryptory anomeryczne muszą być wymienione.

Są dwie ustalone metody wymieniania lokantów:

- (1) w nawiasach pomiędzy składnikami ze strzałką od lokantu glikozylowego składnika do lokantu glikozowego składnika.
- (2) przed glikozylowym składnikiem.

Przykład:



- (1) α -D-glukopiranozylo-(1 $\rightarrow$ 4)- β -D-glukopiranoza
- (2) 4-O- α -D-glukopiranozylo- β -D-glukopiranoza
 β -maltoza (nazwa zwyczajowa; nie β -D-maltoza)

P-102.7.2 Oligosacharydy

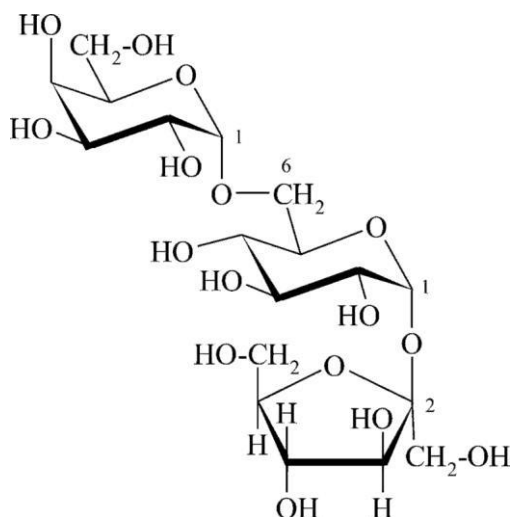
Oligosacharydy są wieloskładnikowymi cukrami z co najmniej trzema jednostkami monosacharydowymi. W zależności od liczby składowych, nazywane są trisacharydami, tetrasacharydami, itd. Nie ma zdefiniowanej liczby jednostek, od której zalicza się dany cukier do polisacharydów.

P-102.7.2.1 Oligosacharydy bez wolnej grupy hemiacetalowej

Trisacharyd nazywa się glikozydem glikozyloglikozyłu lub glikozyloglikozydem glikozyłu.

Wyboru, która z dwu reszt połączonych przez ich anomeryczne wiązania będzie wymieniana jako ‘glikozyd’, dokonuje się na podstawie reguł zawartych w P-102.4. Alternatywą jest sekwencyjne (od końca do końca) podejście do nazywania niezależne od P-102.4. Nazwa jest tworzona preferowaną metodą nazywania disacharydów.

Przykład:

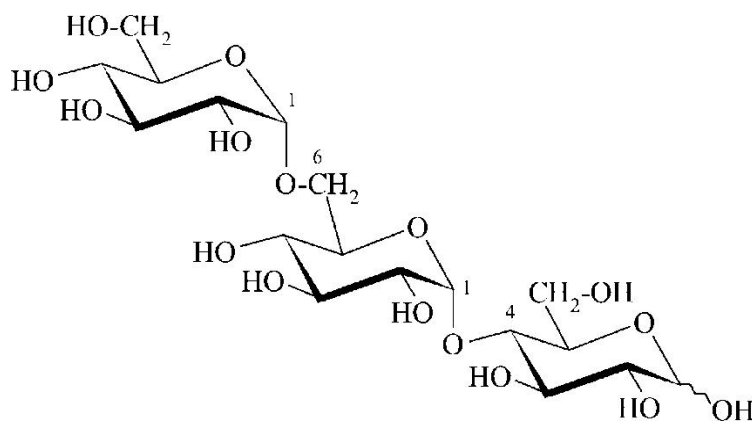


α -D-galaktopiranozylo-(1 $\rightarrow$ 6)- α -D-glukopiranozyd β -D-fruktofuranozylu
(jako ‘glikozyd’ wybrana jest glukoza nie fruktoza)
 β -D-fruktofuranozyl α -D-galaktopiranozylo-(1 $\rightarrow$ 6)- α -D-glukopiranozyłu
(metoda sekwencyjna)
rafinoza (nazwa zwyczajowa)

P-102.7.2.2 Oligosacharydy z wolną grupą hemiacetalową

Oligosacharyd tego rodzaju ma nazwę glikozylo-[glikozylo]_nglikoza, gdzie część ‘glikoza’ jest strukturą macierzystą. Konwencjonalny wzór ma resztę glikozy po stronie prawej. Nazwy tworzy się jak opisano w rozdziale P-102.7.2.1.

Przykład:



α -D-glukopiranozylo-(1 $\rightarrow$ 6)- α -D-glukopiranozylo-(1 $\rightarrow$ 4)-D-glukopiranoza panoza
(nazwa zwyczajowa)

P-103 AMINOKWASY I PEPTYDY

P-103.0 Wprowadzenie

P-103.1 Nazwy, numerowanie i określanie konfiguracji aminokwasów

P-103.2 Pochodne aminokwasów

P-103.3 Nomenklatura peptydów

P-103.0 WPROWADZENIE

Ta sekcja opisuje nomenklaturę aminokwasów stanowiących bloki budulcowe peptydów i białek. Są one funkcyjnymi związkami macierzystymi z nazwami zachowanymi i wymienionymi w Tabeli 10.4. Mniej rozpowszechnione aminokwasy również mają swoje zachowane nazwy (patrz Tabela 10.5). Nomenklatura aminokwasów składa się z dwóch rodzajów nazw: nazw opartych na nazwach zachowanych dla funkcyjnych związków macierzystych z ograniczoną zdolnością do funkcjonalizacji i podstawienia oraz systematycznych nazwach podstawnikowych dla wszystkich innych związków.

Nomenklatura tych aminokwasów i peptydów opisana jest w dokumencie zatytułowanym 'Nomenklatura i Symbole Aminokwasów i Peptydów' (lit. 27). Natomiast dokument obejmujący nomenklaturę cyklicznych peptydów jest obecnie w przygotowaniu. W tej sekcji, nomenklatura tych aminokwasów i peptydów jest ograniczona do ich pochodnych spoza grupy peptydów i białek.

P-103.1 NAZWY, NUMERACJA I OKREŚLANIE KONFIGURACJI AMINOKWASÓW

P-103.1.1 Nazwy zachowane i systematyczne

P-103.1.2 Numerowanie kwasów α -aminokarboksylowychP-103.1.3 Konfiguracja kwasów α -aminokarboksylowych**P-103.1.1 Nazwy zachowane i systematyczne**

P-103.1.1.1 Zachowane nazwy 'pospolitych' aminokwasów

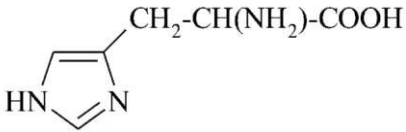
P-103.1.1.2 Zachowane nazwy 'mniej pospolitych' aminokwasów

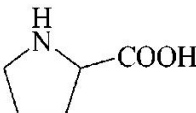
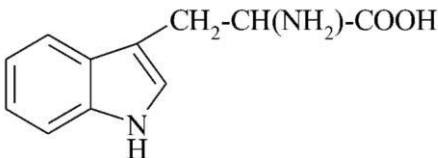
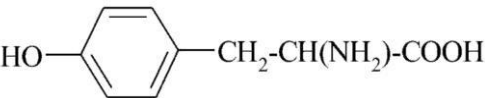
P-103.1.1.3 Systematyczne nazwy podstawnikowe

P-103.1.1.1 Zachowane nazwy 'pospolitych' aminokwasów

Zachowane nazwy α -aminokwasów, które są powszechnie spotykane w białkach i występują w kodzie genetycznym, wraz z ich systematycznymi nazwami, symbolami (3-literowymi i/lub 1-literowymi) i wzorami, podane są w Tabeli 10.4. Niektóre mniej rozpowszechnione aminokwasy zostały omówione w P-103.1.1.2 i wymienione w Tabeli 10.5.

Tabela 10.4 Zachowane nazwy ‘pospolitych’ α-aminokwasów

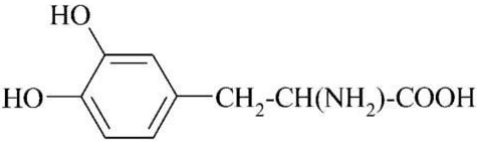
Zachowana nazwa Nazwa systematyczna		Symbole		Wzór
		3-litery	1-litera	
alanina kwas 2-aminopropanowy		Ala	A	$\text{CH}_3\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
arginina kwas 2-amino-5-(karbaimidoamido)pentanowy		Arg	R	$\text{H}_2\text{N-C(=NH)-NH-[CH}_2\text{]}_3\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
asparagina kwas 2,4-diamino-4-oksobutanowy		Asn	N	$\text{H}_2\text{N-CO-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
kwas asparaginowy kwas 2-aminobutanodiowy		Asp	D	$\text{HOOC-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
cysteina kwas 2-amino-3-tiolopropanowy		Cys	C	$\text{HS-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
glutamina kwas 2,5-diamino-5-oksopentanowy		Gln	Q	$\text{H}_2\text{N-CO-[CH}_2\text{]}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
kwas glutaminowy kwas 2-aminopentanodiowy		Glu	E	$\text{HOOC-[CH}_2\text{]}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
glicyna kwas aminooctowy		Gly	G	$\text{H}_2\text{N-CH}_2\text{-COOH}$
histydyna kwas 2-amino-3-(1 <i>H</i> -imidazolo-4-yl)propanowy		His	H	
izoleucyna kwas (2 <i>S</i> ,3 <i>S</i>)-2-amino-3-metylopentanowy (oznaczenie konfiguracji patrz P-103.1.3.2.2)		Ile	I	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
leucyna kwas 2-amino-4-metylopentanowy		Leu	L	$\text{(CH}_3\text{)}_2\text{CH-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
lizyna kwas 2,6-diaminoheksanowy		Lys	K	$\text{H}_2\text{N-[CH}_2\text{]}_4\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$

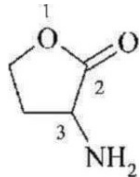
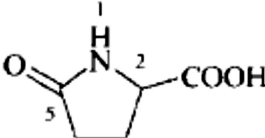
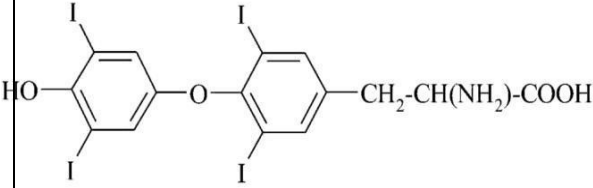
metionina kwas 2-amino-4-(metylotio)-butanowy	Met	M	$\text{CH}_3\text{-S-}[\text{CH}_2]_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
fenyloalanina kwas 2-amino-3-fenylpropanowy	Phe	F	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
prolina kwas pirolidyno-2-karboksylowy	Pro	P	
seryna kwas 2-amino-3-hydroksy propanowy	Ser	S	$\text{HO-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
treonina kwas (2 <i>S</i> ,3 <i>R</i>)-2-amino-3-hydroksy- butanowy (określanie konfiguracji patrz P-103.1.3.2.2)	Thr	T	$\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
tryptofan kwas 2-amino-3-(1 <i>H</i> -indol-3- ilo)propanowy	Trp	W	
tyrozyna kwas 2-amino-3-(4-hydroksy- fenylo)propanowy	Tyr	Y	
walina kwas 2-amino-3-metylobutanowy	Val	V	$(\text{CH}_3)_2\text{CH-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
nieokreślony aminokwas	Xaa	X	

P-103.1.1.2 Zachowane nazwy ‘mniej pospolitych’ aminokwasów

Kilka innych mniej pospolitych aminokwasów, ich nazwy i symbole, przedstawiono w Tabeli 10.5. Pełny opis nazywania ‘mniej pospolitych’ aminokwasów zawiera publikacja ‘Nomenklatura i Symbole Aminokwasów i Peptydów’ (lit. 27).

Tabela 10.5 Aminokwasy i ich zwyczajowe nazwy
(inne niż te podane w Tabeli 10.4)

Zachowana nazwa Nazwa systematyczna	Symbol	Wzór
β -alanina kwas 3-aminopropanowy	β Ala	$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{COOH}$
alloizoleucyna kwas 2-amino-3-metylopentanowy (oznaczenie konfiguracji patrz P-103.1.3.2.2)	alle	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
allotreonina kwas 2-amino-3-hydroksybutanowy (oznaczenie konfiguracji patrz P-103.1.3.2.2)	aThr	$\text{CH}_3-\text{CH}(\text{OH})-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
allizyna kwas 2-amino-6-oksoheksanowy	—	$\text{OHC}-[\text{CH}_2]_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
cytrulina N^5 -karbamiloornityna	Cit	$\text{NH}_2-\text{CO}-\text{NH}-[\text{CH}_2]_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
cystationina <i>S</i> -(2-amino-2-karboksyetylo)homocysteina	Ala Hcy	$\begin{array}{c} \text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \\ \\ \text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \end{array}$
kwas cysteinowy 3-sulfoalanina kwas 2-amino-3-sulfopropanowy	Cya	$\text{HO}_3\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
cystyna 3,3'-disulfanodiyloodialanina	Cys Cys	$\begin{array}{c} \text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \\ \\ \text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \end{array}$
dopa 3-hydroksytyrozyna	—	
homocysteina kwas 2-amino-4-sulfanylobutanowy	Hcy	$\text{HS}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
homoseryna kwas 2-amino-4-hydroksybutanowy	Hse	$\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$

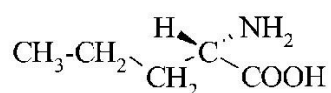
lakton homoseryny 3-aminooksolan-2-on	Hsl	
lantionina 3,3'-sulfanodiyloalalanina	Ala Cys	$\text{CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$ $\text{S-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
ornityna kwas 2,5-diaminopentanowy	Orn	$\text{H}_2\text{N-[CH}_2\text{]}_3\text{-CH(NH}_2\text{)-COOH}$
5-oksoprolina kwas 5-oksopirolidyno-2-karboksylowy	Glp	
sarkozyna N-metyloglicyna	Sar	$\text{CH}_3\text{-NH-CH}_2\text{-COOH}$
tyroksyna O-(4-hydroksy-3,5-dijodofenylo)- 3,5-dijodotyrozyna	Thx	

P-103.1.1.3 Systematyczne nazwy podstawnikowe

Dla aminokwasów nie mających zachowanych nazw tworzy się systematyczne nazwy podstawnikowe w oparciu o zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej.

Systematyczne nazwy podstawnikowe stosuje się dla homologów glicyny i alaniny, na przykład kwas 2-aminobutanowy, kwas 2-aminopentanowy (poprzednio 'norwalina') i kwas 2-aminohexanowy (poprzednio 'norleucyna'). Odpowiadają im trzyliterowe symbole odpowiednio: Abu, Ape i Ahx. Stereodeskryptory D i L stosowane są do wskazania konfiguracji absolutnej przy atomie węgla C-2. Kwasy te i ich symbole są przedstawione w CP-13, lit. 27. Nazwy 'norwalina' i 'norleucyna' nie są nazwami zalecanymi (patrz 3AA-15.2.3, lit. 27).

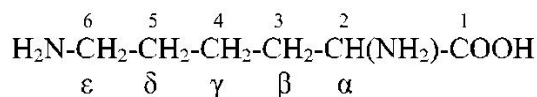
Przykład:



kwas (2*S*)-2-aminopentanowy
(trzyliterowy symbol: Ape)

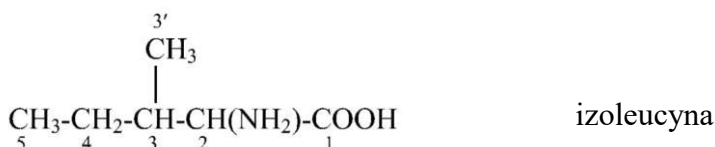
P-103.1.2 Numerowanie kwasów α-aminokarboksylowych

W acyklicznych aminokwasach atom węgla grupy karboksylowej sąsiadujący z atomem węgla związanym z grupą aminową jest oznaczany numerem '1'. Alternatywnie, można użyć greckie litery przy czym atom węgla C-2 oznacza się α.



Heteroatom w grupie charakterystycznej ma ten sam numer co atom węgla, z którym jest związany, na przykład *N*-2 jest na atomie węgla C-2. Kiedy numerację tą stosuje się jako lokanty wówczas zapisywana jest w indeksie górnym, na przykład '*N*²'-acetylolizyna (patrz P-103.2.1).

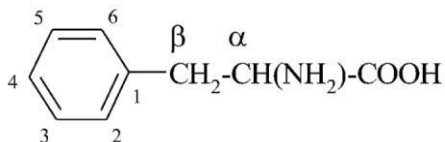
Atomy węgla grup metylowych waliny są numerowane '4' i '4''; podobnie te w leucynie '5' i '5''. Numeracja atomów węgla w izoleucynie przedstawiona jest poniżej:



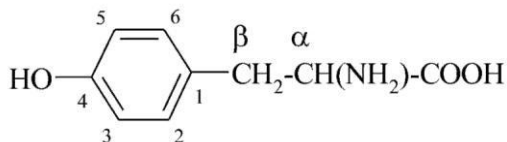
Atomy w prolinie są numerowane tak jak w pirolidynie, atom azotu jest oznaczony numerem '1' a atom węgla związany z grupą karboksylową numerem '2'.



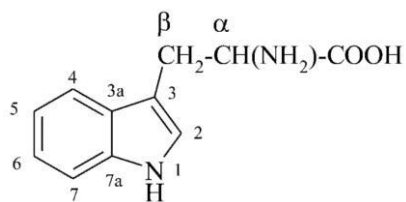
Atomy węgla w pierścieniu aromatycznym fenyloalaniny, tyrozyny i tryptofanu numeruje się zgodnie z zasadami nomenklatury systematycznej. Atomy węgla w łańcuchu są oznaczone jako 'α' i 'β' jak to jest przedstawione poniżej:



fenyloalanina

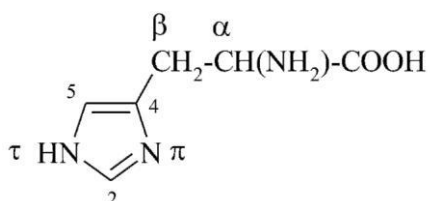


tyrozyna



tryptofan

Specjalna numeracja składająca się z cyfr i greckich liter jest przypisana histydynie. Greckie litery π i τ są stosowane do oznaczenia atomów azotu w pierścieniu. Literą π oznaczony jest atom azotu leżący bliżej łańcucha bocznego, a atom azotu znajdujący się dalej od tego łańcucha literą τ.

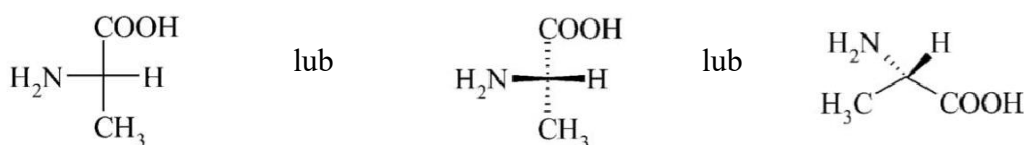


histydyna

P-103.1.3 Konfiguracja kwasów α -aminokarboksylowych**P-103.1.3.1 Stereodeskryptory 'D' i 'L'**

Konfiguracja absolutna atomu węgla α w kwasach α -aminokarboksylowych jest oznaczana stereodeskryptorem 'D' lub 'L' aby wskazać ich formalną relację z aldehydem 'D - lub L-glicerynowym'. Natomiast w przypadku nieznanej konfiguracji stosuje się stereodeskryptor 'ξ' (grecka litera ksi).

Struktura aminokwasów ilustrująca konfigurację może być zapisana na kilka sposobów: w projekcji Fischera (patrz P-102.3.1) lub w formie strukturalnego wzoru zawierającego zwykle i klinowe (ciągłe i przerywane) wiązania (patrz P-91.1), jak jest to przedstawione poniżej dla L-alaniny:



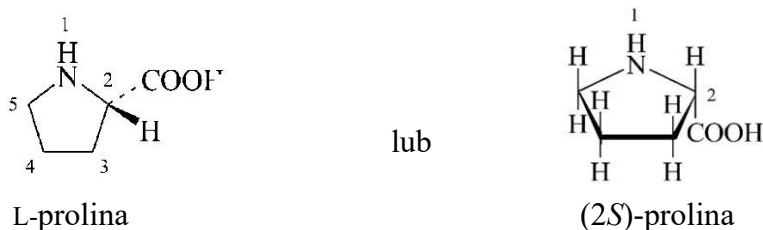
Według systemu Cahna-Ingolda-Preloga (CIP) 'L' aminokwasy mają konfigurację 'S' z wyjątkiem L-cysteiny, dla której z reguły pierwszeństwa wynika konfiguracja 'R' (dotyczy to również cystyny, patrz P-103.1.1.2).

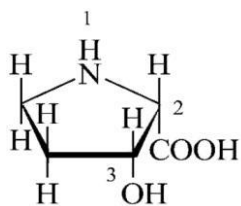


Mieszanina równomolowych ilości 'D' i 'L' aminokwasów określana jest jako 'racemiczna' i oznaczana stereodeskryptorem 'DL', na przykład 'DL-leucyna'. Stereodeskryptor 'DL' preferowany jest względem 'rac', na przykład *rac*-leucyna.

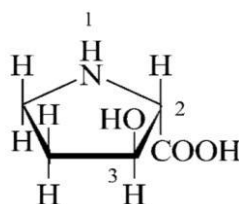
P-103.1.3.2 Konfiguracja centrów chiralności innych niż atom węgla α **P-103.1.3.2.1 Zastosowanie stereodeskryptorów metody CIP**

Stereodeskryptory 'R' i 'S' są stosowane do oznaczania konfiguracji centrów chiralności innych niż atomu α -C, dla którego zachowuje się stereodeskryptory 'D' i 'L' by zachować jednorodność ze stereodeskryptorami w peptydach (patrz P-103.3.4). Zastosowanie stereodeskryptorów jest zaprezentowane poniżej dla hydroksyprolin. Dla tych związków w ogólnej nomenklaturze i specjalistycznej nomenklaturze aminokwasów dopuszczalne jest również stosowanie stereodeskryptorów *cis* i *trans*.





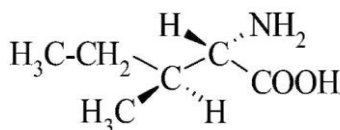
(3*R*)-3-hydroksy-L-prolina (PIN)
(2*S*,3*R*)-3-hydroksyprolina
cis-3-hydroksy-L-prolina



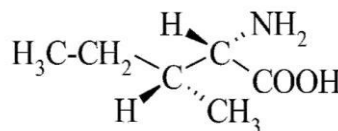
(3*S*)-3-hydroksy-L-prolina (PIN)
(2*S*,3*S*)-3-hydroksyprolina
trans-3-hydroksy-L-prolina

P-103.1.3.2.2 Stosowanie przedrostka 'allo'

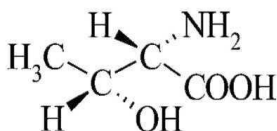
Przedrostek 'allo' jest stosowany do modyfikowania zachowanych nazw 'leucyna' i 'treonina', kiedy konfiguracja na atomie węgla C-3 została odwrócona. Symbole aminokwasu zmienia się, odpowiednio, na 'alle' i 'aThr'.



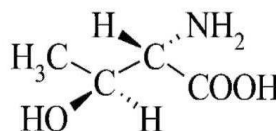
L-izoleucyna (symbol 'Ile', 'I')
kwas (2*S*,3*S*)-2-amino-3-metylopantanowy



L-alloizoleucyna (symbol 'alle')
kwas (2*S*,3*R*)-2-amino-3-metylopantanowy



L-treonina (symbol 'Thr', 'T')
kwas (2*S*,3*R*)-2-amino-3-hydroksybutanowy



L-allotreonina (symbol 'aThr')
kwas (2*S*,3*S*)-2-amino-3-hydroksybutanowy

P-103.2 POCHODNE AMINOKWASÓW

Zachowane nazwy aminokwasów służą do tworzenia nazw soli, estrów i grup acylowych oraz pochodnych utworzonych przez podstawienie na atomach węgla i azotu lub funkcjonalizacji atomów tlenu i siarki.

Grupa karboksylowa, -COOH, może być przekształcana w różne grupy charakterystyczne takie jak grupa hydroksymetylowa, -CH₂-OH, czy grupa aldehydowa, CHO. Niektóre nazwy pochodzące od zachowanych nazw aminokwasów są zalecane do nazywania amidów, alkoholi, aldehydów, a nawet ketonów w kontekście nomenklatury peptydów i białek.

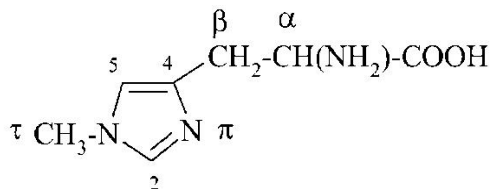
- P-103.2.1 System przypisywania lokantów
- P-103.2.2 Nazwy podstawników
- P-103.2.3 Pochodne utworzone przez podstawienie
- P-103.2.4 Jonizacja grup charakterystycznych
- P-103.2.5 Grupy acylowe
- P-103.2.6 Estry
- P-103.2.7 Amidy i inne pochodne azotowe
- P-103.2.8 Aldehydy, ketony i alkohole

P-103.2.1 System przypisywania lokantów

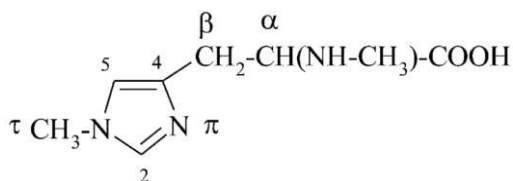
Zaleca się użycie lokantów ‘N’, ‘O’ i ‘S’ wraz z lokantem liczbowym, w indeksie górnym, odpowiadający numerowi atomu węgla z którym związany jest dany atom azotu, tlenu lub siarki dla atomów, których jest więcej niż jeden. Lokanty ‘N²’ i ‘N⁶’ zalecane są dla lizyny, ‘N^α’, ‘N^δ’, ‘N^ω’ dla argininy, ‘N²’ i ‘N⁵’ dla glutaminy, ‘N²’ i ‘N⁴’ dla asparaginy, ‘N^α’, ‘N^π’ i ‘N^τ’ dla histydyny, według numeracji odpowiednich α-aminokwasów opisanej w P-103.1.2. W przypadku gdy obecny jest tylko jeden atom azotu, zalecany jest lokant ‘N’; lokant liczbowy pomijany jest nawet gdy inne lokanty są obecne w nazwie.

W przypadku występowania dwóch identycznych podstawników, stosuje się jednoliterowy lokant umieszczony pomiędzy przedrostkiem zwielfokrotniającym, a nazwą podstawnika.

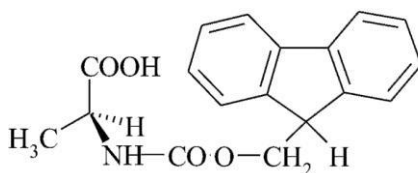
Przykłady:



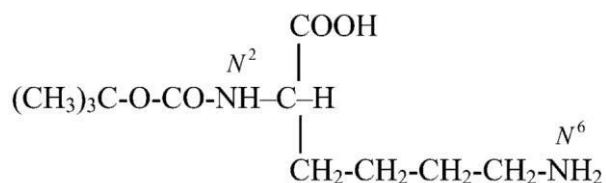
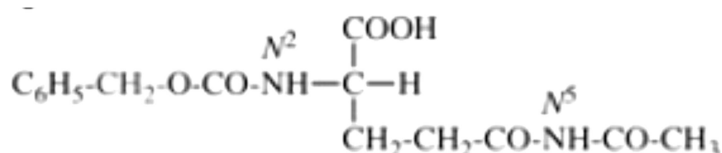
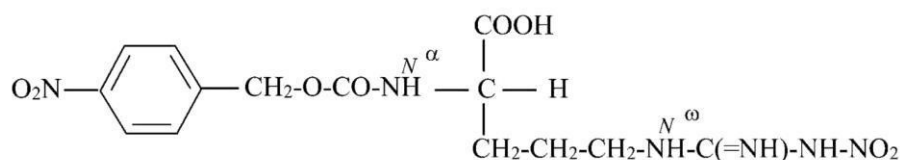
N^{τ} -metylo-L-histydyna



N^{α}, N^{τ} -dimetylo-L-histydyna



N -[(9*H*-fluoren-9-ylometoksy)karbonylo]-L-alanina

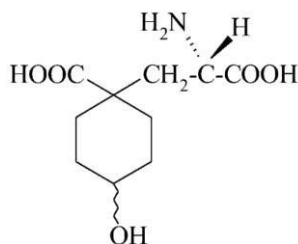
 N^2 -(*tert*-butoksykarbonylo)-L-lizyna N^5 -acetylo- N^2 -[(benzyloksy)karbonylo]-L-glutamina N^α -{[(4-nitrobenzyl)oksy]karbonylo}- N^ω -nitro-L-arginina

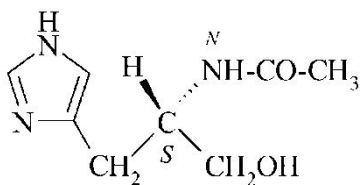
P-103.2.2 Nazwy podstawników

W sytuacji gdy kwasy α -aminokarboksylowe muszą być wymienione jako podstawniki w obecności grup charakterystycznych mających starszeństwo jako przyrostek, tworzy się odpowiednie przedrostki według następujących zasad.

P-103.2.2.1 Podstawniki z wolną walencyjnością na atomie węgla kwasu α -aminokarboksylowego tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej przedstawionej w poprzednich rozdziałach tych zaleceń.

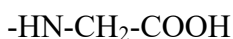
Przykłady:

kwas 1-[(2*S*)-2-amino-2-karboksyetylo]-4ξ-hydroksycykloheksano-1-karboksylowy

N-[(2S)-1-hydroksy-3-(1*H*-imidazol-4-ilo)propan-2-ylo]acetamid**P-103.2.2.2** Podstawniki z wolną walencyjnością na atomie azotu

Nazwy podstawników z wolną walencyjnością na atomie azotu kwasu α -aminokarboksyłowego, powstałych w wyniku usunięcia atomu wodoru z grupy aminowej aminokwasu, można utworzyć poprzez zamianę końcowej litery 'a' w nazwie α -aminokwasu na literę 'o', dodanie litery 'o' do nazwy tryptofan oraz utworzenie nazw asparagino i glutamino, odpowiednio z kwasu asparaginowego i glutaminowego.

Przykład:



glicyno
(karboksymetylo)amino

W przypadku gdy w aminokwasie występuje więcej niż jeden atom azotu, zaleca się stosowanie lokantu ' N^x '.

Przykłady:

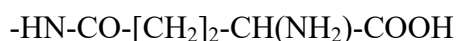


N^6 -lizyno
(5-amino-5-karboksypentylo)amino



N^{ω} -arginino

N^7 -[(4-amino-4-karboksybutylo)amino]karbamimidamido



N^5 -glutamin 4-amino-4-karboksybutanamido

P-103.2.2.3 Podstawniki z wolną walencyjnością na atomie tlenu lub siarki powstałe przez usunięcie atomu wodoru z atomu tlenu lub siarki, można nazwać zamieniając końcową literę 'a' w nazwie α -aminokwasu na 'x-yl', gdzie x jest lokantem atomu z którego usunięto atom wodoru, na przykład cystein-*S*-yl, treonin-*O*-yl.

Przykład:



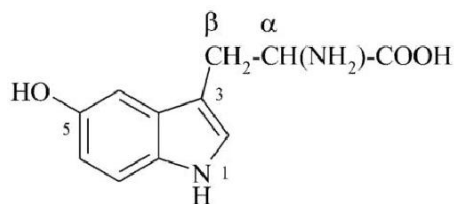
cystein-*S*-yl
(2-amino-2-karboksyetylo)sulfanył

P-103.2.3 Pochodne utworzone poprzez podstawienie

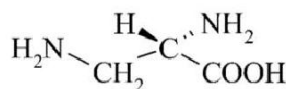
Do wskazania podstawienia na atomie węgla, azotu, tlenu i siarki używa się zachowane nazwy.

Podstawienie na atomach węgla podlega zasadom, regułom i konwencjom nomenklatury podstawnikowej. Lokanty liczbowe i lokanty 'N', 'O' i 'S' wskazują położenie podstawionych atomów azotu, tlenu lub siarki. Dla lizyny stosuje się lokanty 'N²' i 'N⁶' w celu wskazania dwóch grup aminowych położonych odpowiednio w pozycji '2' i '6'.

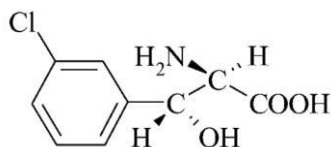
Przykłady:



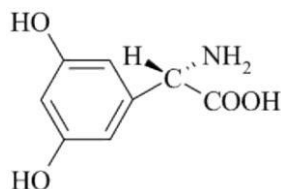
5-hydroksytryptofan



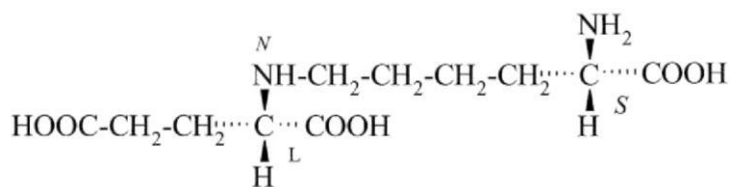
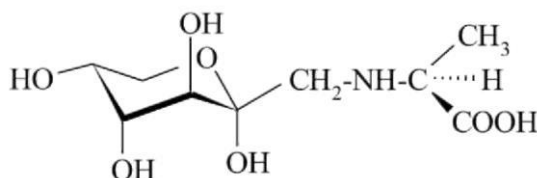
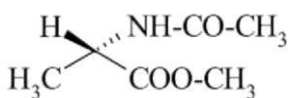
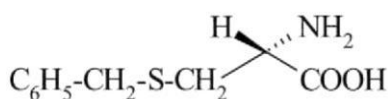
3-amino-L-alanina
kwas (2*S*)-2,3-diaminopropanowy
kwas L-2,3-diaminopropanowy
(2*S*)-2-amino-β-alanina (patrz lit. 27)



kwas (2*R*,3*R*)-2-amino-3-(3-chlorofenylo)-3-hydroksypropanowy
(β*R*)-3-chloro-β-hydroksy-D-fenylalanina



kwas (2*S*)-2-amino-2-(3,5-dihydroksyfenylo)octowy
2-(3,5-dihydroksyfenylo)-L-glicyna

kwas *N*-[(5*S*)-5-amino-5-karboksypentylo]-*L*-glutaminowy*N*-(1-deoksy- α -D-fruktopiranoz-1-ylo)-*L*-alanina*N*-acetylo-*L*-alaninian metylu*S*-benzylo-*L*-cysteina*N,N*-dihydroksyglicynakwas *N*-(1-amino-2-metoksy-2-oksoetylo)azonawy

[kwas, kwas azonawy $(\text{HO})_2\text{NH}$, ma pierwszeństwo względem estru, patrz P-67.1.1.1]

P-103.2.4 Jonizacja grup charakterystycznych

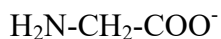
P-103.2.4.1 Dominującą formą kwasu monoamino monokarboksylowego w środowisku obojętnym (pH 7) jest $\text{R}-\text{CH}(\text{NH}_3^+)-\text{COO}^-$ zamiast $\text{R}-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$. Niemniej jednak bardziej praktyczne jest rysowanie form konwencjonalnych jak w Tabelach 10.4 i 10.5 oraz nazywanie aminokwasu alaniny jako kwas 2-aminopropanowy zamiast 2-amoniumylopropanian albo 2-amoniopropanian jak pokazano w Rozdziale P-7 (P-74.1.3).

Jest to szczególnie istotne w przypadku przedstawiania form izoelektrycznych aminokwasów mających inne grupy jonizujące, jak na przykład roztwór lizyny, który zawiera znaczące ilości obu form:



P-103.2.4.2 Gdy pożądane jest zaznaczenie jonowego charakteru aminokwasu, kationy lub aniony pochodzące z kwasu monoamino monokarboksylowego można wskazać następująco: dla anionu końcówka 'ian' zastępuje 'kwas -owy' lub końcówkę 'a' nazwy zwyczajowej, albo jest dodawana do nazwy tryptofan):

Przykłady:



glicynian

anion glicyny



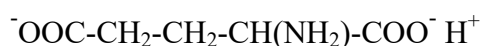
glicynium

kation glicyny

P-103.2.4.3 Dodatkowe formy są wymagane dla aminokwasów zawierających dwie grupy aminowe lub dwie grupy karboksylowe.

P-103.2.4.3.1 Aniony kwasów asparaginowego i glutaminowego z jednym ładunkiem (dokładniej każdy ma jeden ładunek dodatni i dwa ładunki ujemne, jednak ta nomenklatura odnosi się do ładunku wypadkowego) można odróżnić od podwójnie naładowanych anionów poprzez umieszczenie ładunku za nazwą lub zaznaczenie liczby zubożnianych kationów.

Przykłady:



glutaminian (1-)

glutaminian wodoru

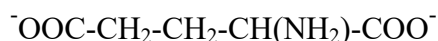
monoanion kwasu glutaminowego



glutaminian sodu (1-)

glutaminian wodoru sodu

glutaminian monosodu



glutaminian (2-)

dianion kwasu glutaminowego

glutaminian (nieokreślona nazwa

'glutaminian' oznacza dianion)



glutaminian disodu

P-103.2.4.3.2 Pojedynczo naładowane kationy argininy, histydyny i lizyny (dokładniej każda ma dwa ładunki dodatnie i jeden ładunek ujemny, jednakże ta nomenklatura odnosi się do ładunku wypadkowego) można odróżnić od podwójnie naładowanych kationów umieszczając ładunek za nazwą, stosując wyrażenie 'monokation', lub określając liczbę zubożnianych anionów. Położenie ładunku można określić za pomocą lokantu *N* z indeksem górnym przed końcówką 'ium'.

Przykłady:



lizynium (1+)

monokation lizyny

lizyn-*N*²-ium



chlorek lizyniumy (1+)

monochlorowodorek lizyny

chlorek lizyn-*N*²-ium



lizynium (2+)

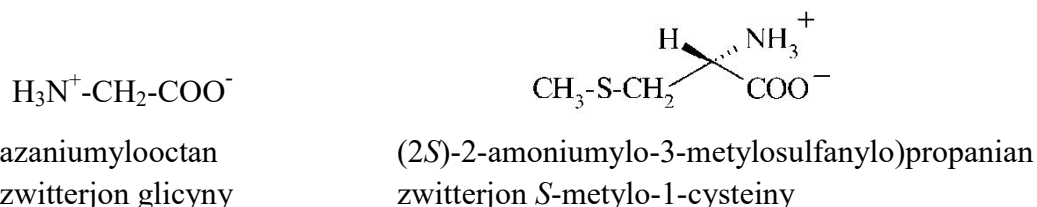
dikation lizyny

lizyno-*N*²,*N*⁶-diium

P-103.2.4.4 Nazwy zwitterjonowych aminokwasów tworzy się na dwa sposoby:

- (1) Dodając do nazwy macierzystego anionu przedrostek w postaci nazwy podstawnika kationowego (patrz P-74.1.3) i stosując stereodeskryptory CIP do wskazania konfiguracji;
- (2) Dodając termin ‘zwitterjon’ przed nazwą aminokwasu.

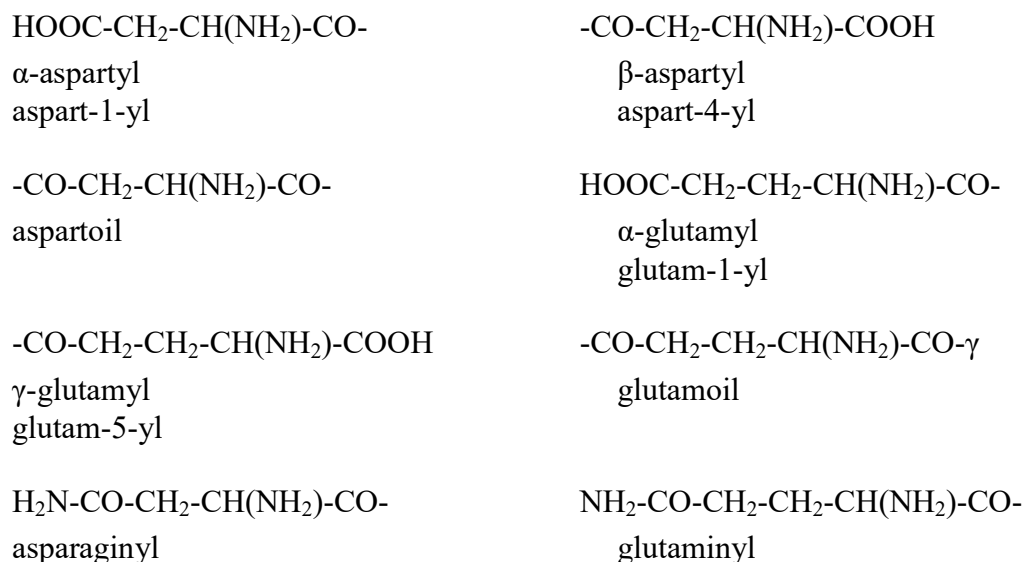
Przykłady:



P-103.2.5 Grupy acylowe

Grupy acylowe pochodzące od aminokwasów, na przykład $\text{H}_2\text{N}-\text{CHR}-\text{CO}-$ nazywa się zamieniając końcówki ‘ina’ lub ‘yna’ (w przypadku tryptofanu ‘an’) na końcówkę ‘yl’, na przykład alanyl, leucyl. W przypadku nazw walina i prolina końcówka ‘ina’ zamieniana jest na końcówkę ‘il’. Obowiązuje nazwa ‘cysteinyl’ zamiast ‘cystyl’; ‘cystyl’ pochodzi od ‘cystyny’ (patrz P-103.1.1.2).

Następujące nazwy stosuje się do nazywania grup acylowych pochodzących od aminokwasów dikarboksylowych i ich odpowiednich amidów:



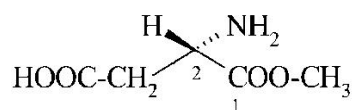
P-103.2.6 Estrы

Nazwy estrów aminokwasów, $\text{R}-\text{CO}-\text{OR}'$, tworzy się dodając końcówkę ‘ian’ do nazwy zachowanej aminokwasu, z której usunięto końcową literę ‘a’ (lub dodając końcówkę ‘ian’ do nazwy ‘tryptofan’) i wymieniając nazwę podstawnika R’.

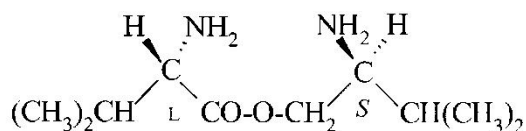
Przykłady:



L-alaninian metylu
ester metylowy L-alaniny



L-asparaginian 1-metylu



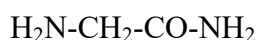
L-walinian (2S)-2-amino-3-metylobutyłu

P-103.2.7 Amidy, anilidy, hydrazydy i inne azotowe analogi

Amidy, anilidy, hydrazydy i inne azotowe analogiczne pochodne utworzone z aminokwasów nazywa się systematycznie.

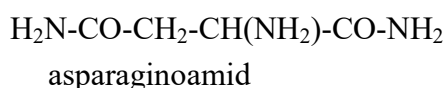
Nazwy amidowych pochodnych aminokwasów tworzy się zamieniając końcową literę 'a' w nazwach aminokwasów, kiedy to właściwe, na 'amid' lub dodaje się końcówkę 'amid' do nazwy 'tryptofan'.

Przykłady:

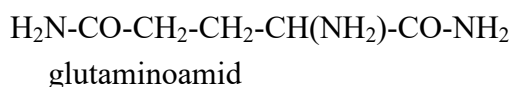


2-aminoacetamid
glicynoamid

4-Amid kwasu asparaginowego oraz 5-amid kwasu glutaminowego mają odpowiednio nazwy asparagina i glutamina (patrz Tabela 10.4). Nazwy ich 1-amidów tworzy się w następujący sposób:



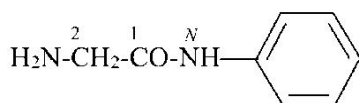
2-aminobutanodiamid



2-aminopentanodiamid

Nazwy anilidów tworzy się przez *N*-podstawienie grupy amidowej grupą fenyłową lub podstawioną grupą fenyłową. Końcówka 'anilid' może być stosowana w miejsce końcówki 'amid':

Przykład:



2-amino-*N*¹-fenyloacetamid
glicyanoanilid

Podstawienie na atomach azotu w amidach aminokwasów wyraża się systematycznie według metod opisanych dla amidów (P-66.1.1.3) i amin (P-62.2.2.1).

Przykłady:



N-etylo-2-(metyloamino)acetamid



2-(acetyloamino)acetamid

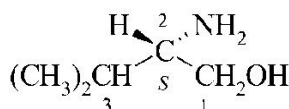
2-acetamidoacetamid

*N*²-acetyloglicynoamid

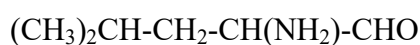
P-103.2.8 Alkohole, aldehydy, ketony i nityle

Nazwy alkoholi, aldehydów, ketonów i nityli odpowiadających aminokwasom ze zwyczajowymi zachowanymi nazwami tworzy się systematycznie stosując zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej. Końcówki 'ol' 'al' i 'onitryl' dodaje się do nazw zachowanych, z których usunięto ostatnią literę 'a', mogą być też zastosowane do określenia zmiany w grupie charakterystycznej aminokwasu. Ketony nazywa się stosując systematyczną nomenklaturę podstawnikową IUPAC z zastosowaniem, w razie potrzeby, stereodeskryptorów '*R*' i '*S*'.

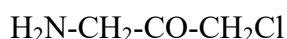
Przykłady:



(2*S*)-2-amino-3-metylobutan-1-ol L-walinol



2-amino-4-metylopentanal
leucynal



1-amino-3-chloropropan-2-on



aminoacetonitryl
glicynonitryl

P-103.3 NOMENKLATURA PEPTYDÓW

Nomenklatura peptydów jest wysoce wyspecjalizowana i została szczegółowo omówiona w lit. 18. Natomiast dokument obejmujący nomenklaturę cyklicznych peptydów jest obecnie w przygotowaniu przez Chemical Nomenclature and Structure Representation Division IUPAC.

P-103.3.1 Definicje

P-103.3.2 Nazwy peptydów

P-103.3.3 Symbole peptydów

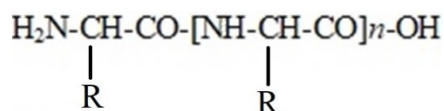
P-103.3.4 Określanie konfiguracji peptydów

P-103.3.5 Modyfikacje peptydów o ustalonej nazwie

P-103.3.6 Cykliczne peptydy

P-103.3.1 Definicje

Peptydy-są-amidami powstałymi z dwóch lub więcej cząsteczek kwasów aminokarboksylowych (takich samych lub różnych) połączonych wiązaniem kowalencyjnym utworzonym pomiędzy atomem węgla grupy karbonylowej jednej cząsteczki a atomem azotu kolejnej cząsteczki z usunięciem wody. Nazwę tę stosuje się zazwyczaj do struktur utworzonych z kwasów α -aminokarboksylowych, jednakże dotyczy ona struktur utworzonych z jakichkolwiek kwasów aminokarboksylowych. W poniższym przykładzie, 'R' może być dowolną grupą organylową, często lecz nie koniecznie występującej w naturalnych aminokwasach (patrz Tabela 10.4).



Wiązania amidowe w peptydach nazywa się 'wiązaniami peptydowymi'. Wiązania peptydowe utworzone pomiędzy atomem węgla 'C-1' a atomem azotu 'N-2' kolejnego aminokwasu nazywa się 'wiązania eupeptydowe'. Natomiast wiązania utworzone pomiędzy atomem węgla grupy karboksylowej jednego aminokwasu a atomem azotu grupy aminowej innego aminokwasu, z których przynajmniej jedna z tych grup nie jest połączona z atomem węgla w pozycji α aminokwasu nazywa się 'wiązanie izopeptydowe'.

P-103.3.2 Nazwy peptydów

Aby nazwać peptydy, stosuje się nazwy grup acylowych z końcówką 'yl' (patrz P-103.2.5). Dlatego dipeptyd, $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{NH}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{COOH}$, zbudowany z aminokwasów glicyny, $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{COOH}$, i alaniny, $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{COOH}$, nosi nazwę glicyloalanina. Natomiast gdy aminokwasy te połączą się w odwrotnej kolejności to produkt, $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CO}-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{COOH}$, będzie nosił nazwę alanyloglicyna. Podobnie nazywa się bardziej złożone peptydy, na przykład alanyloleucylotryptofan.

P-103.3.3 Symbole peptydów

Peptyd glicyloglicyloglicyna można zapisać symbolicznie: Gly-Gly-Gly. Zapis ten zawiera trzy warianty symbolu Gly dla glicyny, $\text{HN}_2-\text{CH}_2-\text{COOH}$, różniących się położeniem myślników:

- (a) Gly- = $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CO}-$
- (b) -Gly = $-\text{HN}-\text{CH}_2-\text{COOH}$
- (c) -Gly- = $-\text{HN}-\text{CH}_2-\text{CO}-$

Myślnik, oznaczający wiązanie peptydowe, symbolizuje usunięcie grupy $-\text{OH}$ z grupy $-\text{COOH}$ aminokwasu gdy zapisany jest po stronie prawej lub atomu wodoru z grupy $-\text{NH}_2$ aminokwasu gdy zapisany jest po stronie lewej symbolu aminokwasu.

P-103.3.4 Określanie konfiguracji peptydów

Stereodeskryptor 'L' nie jest zalecany ani w nazwach ani w symbolach peptydów zbudowanych z aminokwasów przedstawionych w Tabeli 10.4. W przeciwieństwie do stereodeskryptora 'D', który należy umieszczać przed grupą acylową lub nazwą każdego składnika mającego taką konfigurację.

Przykład:

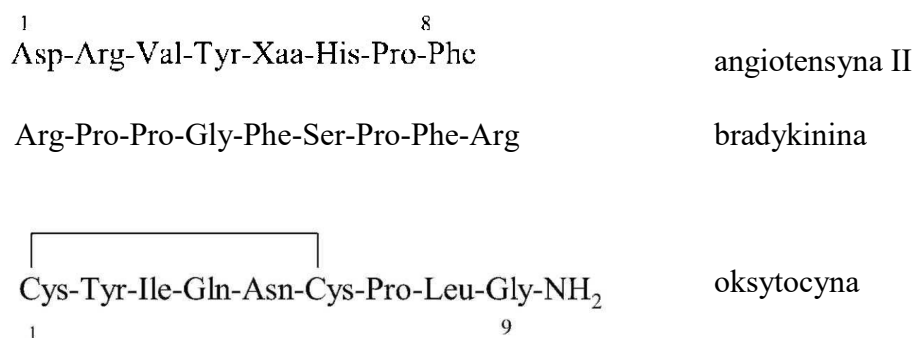
Leu-D-Glu-L-aThr-D-Val-Leu (symbol aThr oznacza allotreonine)
L-leucylo-D-glutamylo-L-allotreonylo-D-walinylo-L-leucyna

Symbol 'DL' stosuje się do wskazania mieszaniny racemicznej gdy obecne jest jedno centrum chiralności (P-103.1.3.1), jednak symbol ten nie jest dopuszczalny w przypadku peptydów ponieważ wskazywałby występowanie diastereoizomerów w nieznannej proporcji. W celu zaznaczenia obecności obu stereoizomerów stosuje się, zapisany kursywą, przedrostek *ambo*, na przykład w wyniku acylowania L-leucyny DL-alaniną otrzymuje się *ambo*-alanyloleucynę lub *ambo*-Ala-Leu.

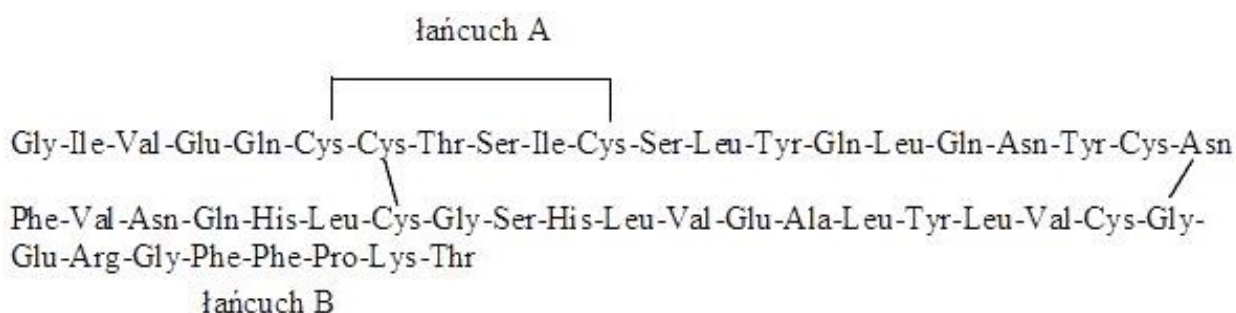
Resztę o nieznannej konfiguracji wskazuje się stereodeskryptorem 'ξ' (grecka litera ksi). Enancjomer peptydu mającego zachowaną nazwę jest określony za pomocą przedrostka *ent* (dla *enantio* patrz P-101.8.1), na przykład *ent*-bradykinina z bradykininy.

P-103.3.5 Modyfikacje peptydów o zachowanej nazwie.

Często ze względów praktycznych określa się strukturę przez odniesienie do zachowanej nazwy sekwencji, której dany peptyd jest wariantem. Poniższe zalecenia zezwalające na to dotyczą tylko modyfikacji sekwencji dotyczących normalnych połączeń amidowych pomiędzy resztami. W celu zilustrowania tych zaleceń poniżej przedstawiono zachowane nazwy angiotensyny II, bradykininy, oksytocyny i insuliny (ludzkiej).



Określenie sekwencji może wymagać podania nazwy gatunku organizmu z którego dany peptyd pochodzi wraz z nazwą peptydu (patrz insulina). Nazwa gatunku zapisywana jest w takim przypadku w nawiasie za nazwą peptydu.



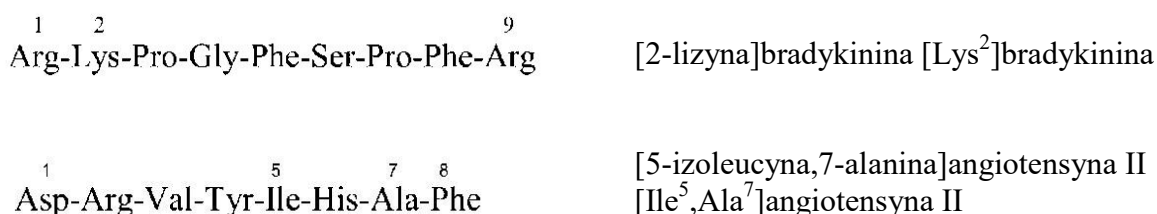
insulina (ludzka)

- | | |
|-------------|-----------------------------------|
| P-103.3.5.1 | Wymiana reszt aminokwasów |
| P-103.3.5.2 | Przedłużanie łańcucha peptydowego |
| P-103.3.5.3 | Wstawianie reszt aminokwasów |
| P-103.3.5.4 | Usuwanie reszt aminokwasów |

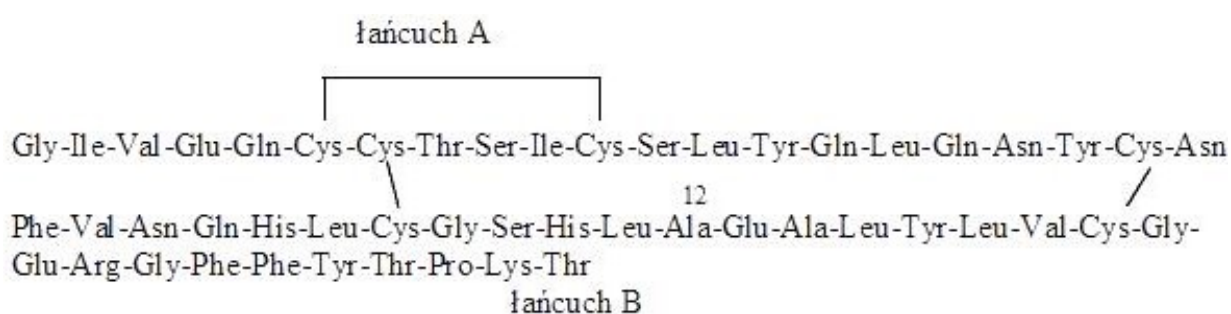
P-103.3.5.1 Wymiana reszt aminokwasów

Gdy w peptydzie o nazwie zwyczajowej bradykinina, *q*-enta reszta aminokwasowa, zaczynając od 'N-końca' łańcucha peptydu, wymieniana jest na aminokwas 'Xaa', nazwa tak zmodyfikowanego peptydu jest [*q*-aminokwas]bradykinina lub w skróconej postaci [Xaa^{*q*}]bradykinina. W pełnej nazwie zmodyfikowanego peptydu wprowadzany aminokwas jest określany z zastosowaniem nazwy tego aminokwasu, a nie nazwy jego grupy acylowej (np. alanina, a nie alanylo). W postaci skróconej, reszty aminokwasowe przedstawia się za pomocą trójliterowych symboli. Natomiast pozycję wymiany wskazuje się w indeksie górnym.

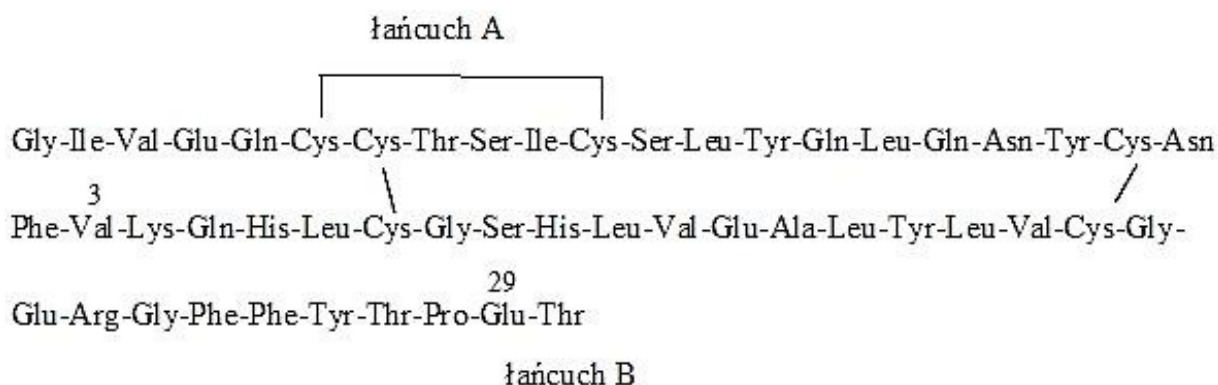
Przykłady:



P-103.3.5.1.1 Określenie sekwencji może wymagać podania nazwy gatunku organizmu z jakiego dany peptyd pochodzi wraz z nazwą peptydu. Nazwa gatunku zapisywana jest w takim przypadku w nawiasie za nazwą peptydu zawsze gdy dodawany jest zmieniony przedrostek.



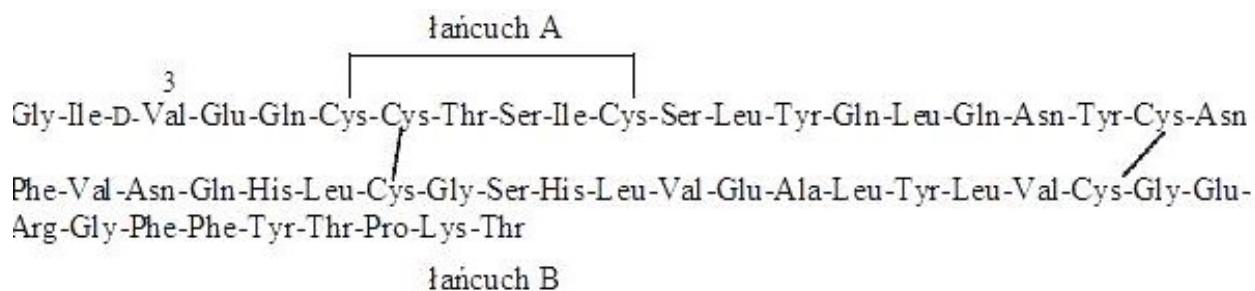
[Ala^{B12}]insulina (ludzka)



[B3-lizyna, B29-kwas glutaminowy]insulina (ludzka)

P-103.3.5.1.2 Wymiana reszty aminokwasu na jego enancjomer określa się w następujący sposób: zamieniając L-prolinę w pozycji 3 na D-prolinę otrzymujemy peptyd o nazwie [3-D-prolina]bradykinina z formą skrótową [D-Pro³]bradykinina. Natomiast do opisu występowania obu enancjomerów stosuje się nazwy [3-*ambo*-prolina]bradykinina lub [*ambo*-Pro³]bradykinina.

Przykład:



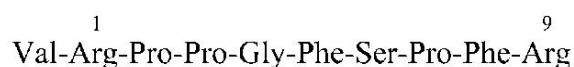
[D-Val^{A3}]insulina (ludzka)

P-103.3.5.2 Przedłużanie łańcucha peptydowego

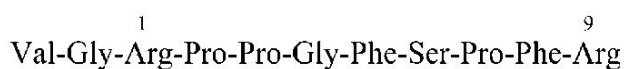
Zasady nazywania związków uzyskanych przez przedłużenie łańcucha peptydowego na N-końcu lub C-końcu przedstawiono poniżej.

P-103.3.5.2.1 Przedłużanie na 'N-końcu'

Przykłady:

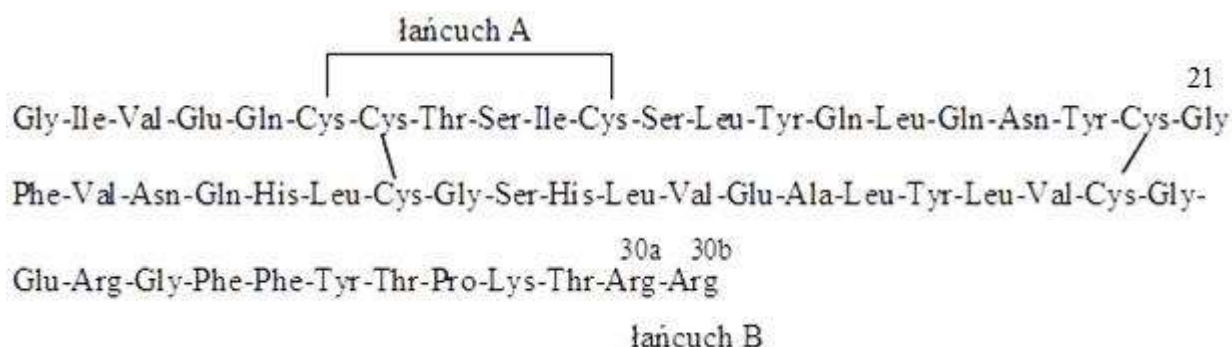


walilobradynykinina
Val-bradykinina



waliloglicylobradykinina
Val-Gly-bradykinina

Przykłady:

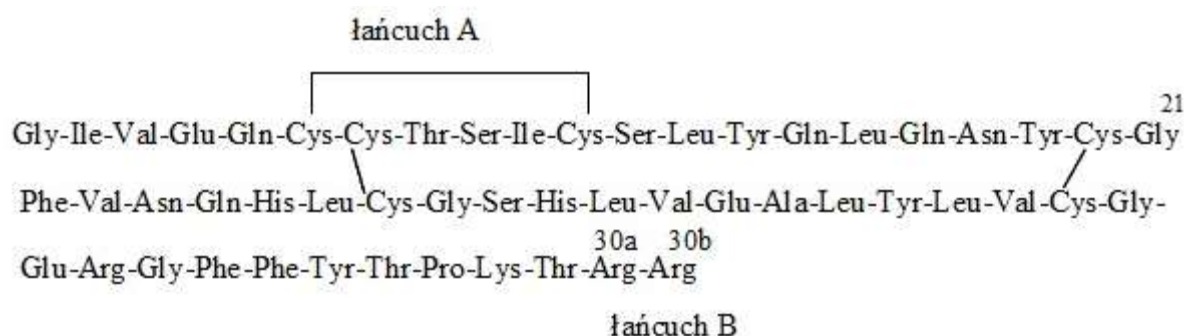


[A21-glicyna]insulin-B30-yl-L-argininyl-L-arginina] (ludzka)
(insulina ta została zmodyfikowana poprzez wymianę w łańcuchu A
oraz wydłużenie na C-końcu w łańcuchu B)

P-103.3.5.2.2 Przedłużanie na 'C-końcu'



bradykininyleucyna
bradykininyl-Leu

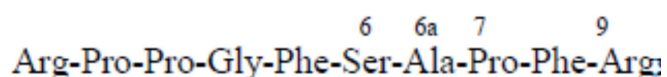


insulin-B30-yl-L-argininyl-L-arginina (ludzka)

P-103.3.5.3 Wstawianie reszt aminokwasowych

W nomenklaturze peptydów przedrostek 'endo' (nie zapisany kursywą) stosuję się do zaznaczenia wstawienia reszty aminokwasowej w dokładnie określonej pozycji peptydu. Na przykład nazwa endo-6a-alanina-bradykinina lub [endo-Ala^{6a}]bradykinina oznacza, iż reszta aminokwasowa 'alanylo' została wstawiona pomiędzy pozycję 6 i 7 w strukturze bradykininy. Przedrostka 'endo' nie należy mylić z zalecanym stereodeskryptorem 'endo' (pisanym kursywą) opisanym w P-93.5.2.2.1.

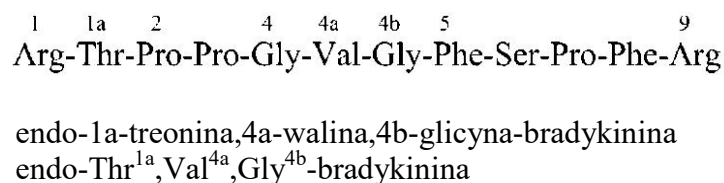
Przykład:



endo-6a-alanina-bradykinina
[endo-Ala^{6a}]bradykinina

Wstawianie wielokrotne i wstawienie maksymalnie dwóch reszt razem w tym samym miejscu w łańcuchu określa się poprzez rozszerzenie powyższej zasady. Dlatego peptyd otrzymany w wyniku wstawienia do struktury bradykininy treoniny pomiędzy reszty 1 i 2, oraz waliny i glicyny (w podanej kolejności) pomiędzy reszty 4 i 5 nosi nazwę ‘endo-1a-treonina,4a-walina,4b-glicyna-bradykinina’ lub ‘endo-Thr^{1a},Val^{4a},Gly^{4b}-bradykinina’.

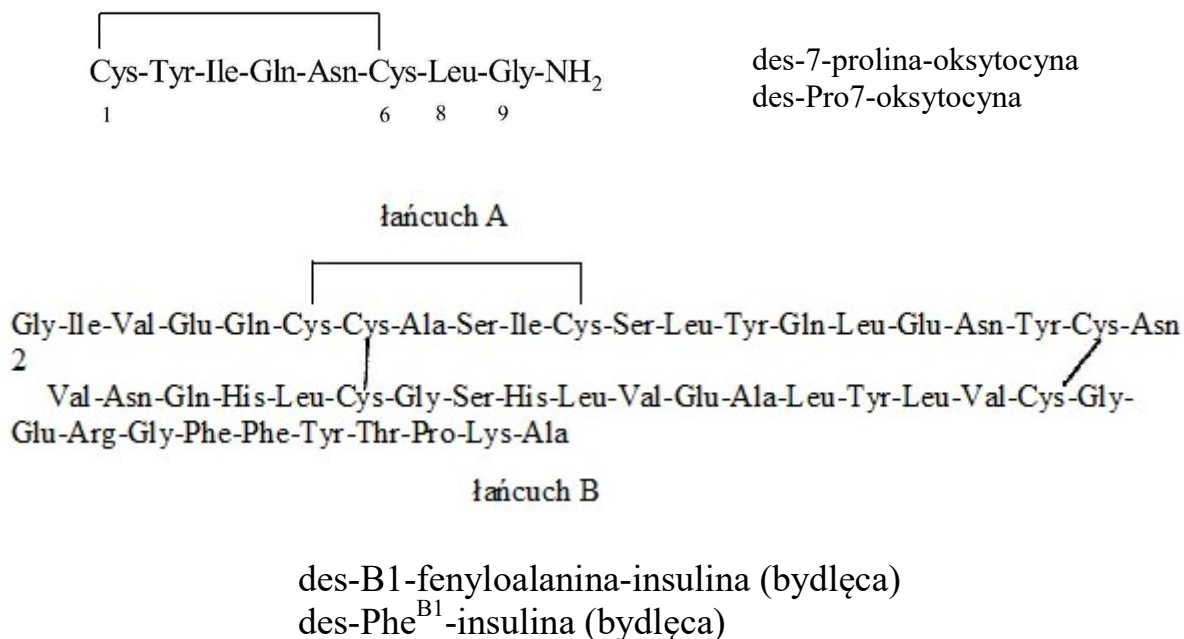
Przykład:



P-103.3.5.4 Usuwanie reszt aminokwasowych

Subtraktywny przedrostek 'des' w nomenklaturze peptydów stosuje się w celu wskazania reszty aminokwasu usuniętej z określonej pozycji w strukturze peptydu. Na przykład, nazwa des-8-fenylalanina-bradykinina lub w skrócie des-Phe⁸-bradykinina oznacza, iż reszta aminokwasu 'fenylalaniny' została usunięta z pozycji 8 łańcucha bradykininy. Zastosowanie przedrostka 'des' do opisu modyfikacji struktur macierzystych przedstawiono także w P-101. Jest on stosowany do wskazania usunięcia końcowego pierścienia w steroidach i przyłączenia odpowiedniej liczby atomów wodoru do każdego końca sąsiedniego pierścienia.

Przykłady:



P-103.3.6 Cykliczne peptydy

Peptydy cykliczne zawierają pierścienie powstałe z peptydów niecyklicznych poprzez tworzenie wiązań peptydowych lub estrowych, mostków dwusiarczkowych, wiązań węgiel-węgiel, węgiel-azot, węgiel-tlen lub węgiel siarka (wyłączając estry i amidy). W cyklicznych peptydach, w których pierścienie zawierają jedynie reszty aminokwasowe z wiązaniami eupeptydowymi nazywa się homodetycznymi cyklicznymi peptydami, natomiast z wiązaniami eupeptydowymi i izopeptydowymi nazywa się heterodetycznymi cyklicznymi peptydami. Ten aspekt nomenklatury peptydów jest na etapie opracowywania przez IUPAC.

P-104 CYKLITOLE**P-104.0** Wprowadzenie**P-104.1** Definicje**P-104.2** Tworzenie nazwy**P-104.3** Pochodne cyklitol**P-104.0** WPROWADZENIE

Nomenklatura cyklitol jest opisana w dokumencie zatytułowanym ‘Nomenklatura cyklitol, Zalecenia 1973’ (lit. 39).

P-104.1 DEFINICJE

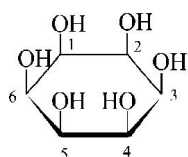
Cyklitole są cykloalkanami, w których trzy lub więcej atomów w pierścieniu jest podstawionych, każdy jedną, grupą hydroksylową. Inozytyle, cykloheksan-1,2,3,4,5,6-heksaole, są specyficzną grupą cyklitol.

Inozytyle mają zachowane nazwy i wraz z ich *O*-alkilo, *O*-arylo, alkanianymi/karboksyłowymi estrami i pochodnymi aminowymi (gdzie grupa -OH zastąpiona jest grupą -NH₂) do określenia ich konfiguracji stosuje się stereodeskryptory ‘D’ i ‘L’. Inne nazwy cyklitol są systematycznymi nazwami podstawnikowymi, których konfigurację opisuje się za pomocą stereodeskryptorów CIP.

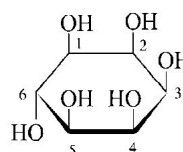
P-104.2 TWORZENIE NAZW

Istnieją różne zalecane metody tworzenia nazw cyklitol.

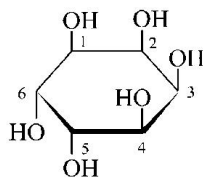
P-104.2.1 Stereoizomeryczne inozytyle opisuje się dodając do nazwy ‘inozytol’ pisane kursywą przedrostki. W przedstawionej metodzie numery pozycji zapisuje się w nawiasach okrągłych. Preferowane są nazwy z przedrostkami.



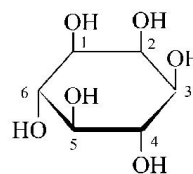
cis-inozytol
(1,2,3,4,5,6/0-)



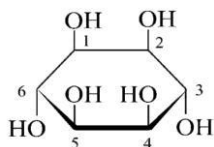
epi-inozytol
(1,2,3,4,5/6-)



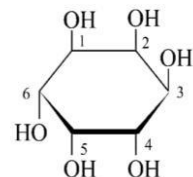
allo-inozytol
(1,2,3,4/5,6-)



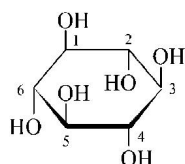
mio-inozyto
(1,2,3,5/4,6-)



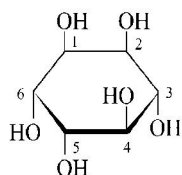
muko-inozytol
(1,2,4,5/3,6-)



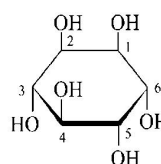
neo-inozyt
(1,2,3/4,5,6-)



scyllo-inozytol (1,3,5/2,4,6-)



1*L*-*chiro*-inozytol
(1,2,4/3,5,6-)
[dawniej *L*-*chiro*-inozytol
lub (-)-inozytol]

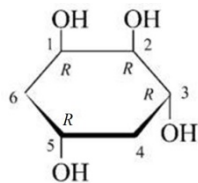


1*D*-*chiro*-inozytol
(1,2,4/3,5,6-)
[dawniej *D*-*chiro*-inozytol
lub (+)-inozytol]

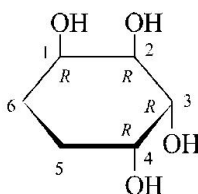
Konfigurację absolutną cyklitolu oznacza się jako ‘D’ lub ‘L’ i określa się ją w następujący sposób. W płasko przedstawionym pierścieniu cyklitolu, w którym grupa hydroksylowa przy atomie węgla oznaczonym numerem ‘1’ jest powyżej płaszczyzny pierścienia, konfiguracja ‘L’ odpowiada numeracji atomów węgla w pierścieniu zgodnej z ruchem wskazówek zegara podczas gdy konfiguracja ‘D’ odpowiada numeracji atomów węgla przeciwnej do ruchu wskazówek zegara jak to ilustrują powyżej dwa enancjomeryczne *chiro*-inozytole. Stereodeskryptory ‘D’ i ‘L’ wraz z występującym po nim myślnikiem zapisuje się przed nazwą związku i poprzedza numerem lokantu definiującego centrum chiralności np. ‘1’ jak pokazano powyżej.

P-104.2.2 Nazwy cyklitolu, z wyjątkiem inozytolu, tworzy się systematycznie wychodząc z cykloheksanu jako macierzystej struktury. Do opisu stereoizomerów stosuje się metodę CIP i jej reguły sekwencji. Ta metoda jest preferowana względem pozycyjnej numeracji opisanej w P-104.2.3.

Przykłady:



(1*R*,2*R*,3*R*,5*R*)-cykloheksano-1,2,3,5-tetraol



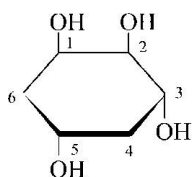
(1*R*,2*R*,3*R*,4*R*)-cykloheksano-1,2,3,4-tetraol

P-104.2.3 Lokanty są przypisane do grup hydroksylowych w cyklitolach, tak więc kierunek numerowania jest opisany w odniesieniu do przestrzennych relacji i charakteru podstawników występujących w pierścieniu. Podstawniki występujące powyżej płaszczyzny pierścienia stanowią jeden zbiór, a znajdujące się poniżej płaszczyzny pierścienia drugi zbiór. Najniższe lokanty odnoszą się do jednego zbioru podstawników zgodnie z przedstawionymi poniżej kryteriami, które stosuje się kolejno aż do rozstrzygnięcia:

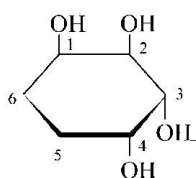
- do podstawników traktowanych jako numeryczna seria bez względu na konfigurację;
- jeżeli jeden zbiór podstawników jest liczniejszy od drugiego, do bardziej liczniejszego;
- jeżeli zbiory są jednakowo liczne i jeden z nich może być oznaczony niższymi numerami, to do tego zbioru;
- do podstawników innych niż niezmodyfikowane grupy hydroksylowe;
- do podstawnika wymienianego jako pierwszy w porządku alfanumerycznym;
- do tych oznaczeń, które prowadzą do 'L' a nie 'D' konfiguracji jak to określa metoda opisana powyżej w P-104.2.1 (dotyczy wyłącznie związków *mezo*).

Numery pozycji są opisane przez wyrażenie, w którym licznik jest zbiorem podstawników o najniższych lokantach, ułożonymi w kolejności rosnącej, a mianownikiem jest drugi zbiór podstawników.

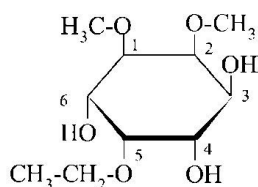
Przykłady:



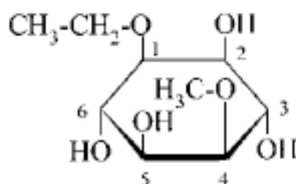
1L-1,2/3,5-cykloheksanotetraol [kryterium (a) i (c)]
(1*R*,2*R*,3*R*,5*R*)-cykloheksano-1,2,3,5-tetraol



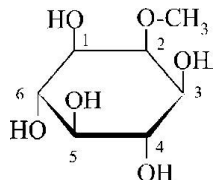
1L-1,2/3,4-cykloheksanotetraol [kryterium (a)]
(1*R*,2*R*,3*R*,4*R*)-cykloheksano-1,2,3,4-tetraol



1L-5-*O*-etylo-1,2-di-*O*-metylo-*neo*-inozytol [kryterium (d)]



1 L-1-*O*-etylo-4-*O*-metylo-*muko*-inozytol [kryterium (d) i (e)]



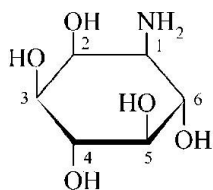
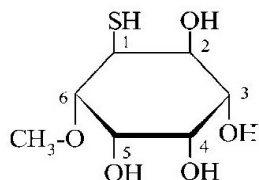
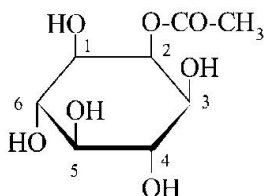
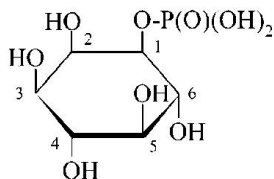
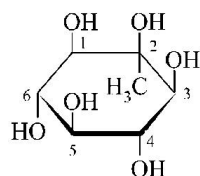
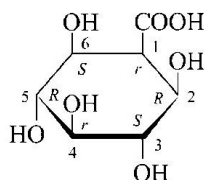
2-*O*-metylo-*mio*-inozytol [kryterium (b) i (f)]

P-104.3 POCHODNE CYKLITOLI

P-104.3.1 Pochodne inozytoli

Do utworzenia nazw pochodnych inozytoli modyfikuje się w taki sam sposób jak węglowodany. Nie ma żadnych ograniczeń jeśli chodzi o *O*-substytucję grupami alkilowymi (aryłowymi) (patrz P-102.5.6.1). Grupy hydroksylowe mogą być wymieniane na grupy aminowe stosując operację ‘deoksy’ (patrz P-102.5.4). Kiedy grupy charakterystyczne o wyższym starszeństwie od grup hydroksylowych są wstawiane w ich miejsce, muszą zostać utworzone nazwy w pełni podstawnikowe. Jednakże estry są nazywane alkanianami/karboksyłanami. Numeracja inozytoli pozostaje bez zmian i konfiguracja jest określana stereodeskryptorami ‘L’ lub ‘D’.

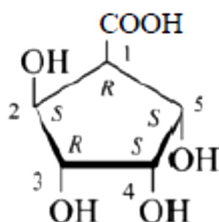
Przykłady:

1D-1-amino-1-deoksy-*mio*-inozytol1L-1-deoksy-6-*O*-metylo-1-sulfanylo-*allo*-inozytol
(nie 1L-6-*O*-metylo-1-tio-*allo*-inozytol)
(1*S*,2*R*,3*S*,4*S*,5*S*,6*S*)-5-metoksy-6-sulfanylocyklo-
heksano-1,2,3,4-tetraol2-octan *mio*-inozytolu
(nazwy estrów węglowodanów patrz P-102.5.6.1.1)1-(fosforan diwodoru) 1D-*mio*-inozytolu2-*C*-metylo-*mio*-inozytol
(1*s*,2*R*,3*S*,4*s*,5*R*,6*S*)-1-metylocykloheksano-
1,2,3,4,5,6-heksaol2-deoksy-2-karboksy-*mio*-inozytol
kwas (1*r*,2*R*,3*S*,4*r*,5*R*,6*S*)-2,3,4,5,6-pentahydroksycykloheksano-1-karboksylowy
(nie 2-deoksy-2-karboksy-*mio*-inozytol; COOH jest starsze od OH)

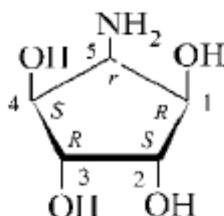
P-104.3.2 Pochodne cyklitolu inne niż inozytyle

Nazwy pochodnych cyklitolu innych niż inozytol konstruuje się w oparciu o zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej opisane w rozdziałach od P-1 do P-9.

Przykłady:



kwas (1*R*,2*S*,3*R*,4*S*,5*S*)-2,3,4,5-tetrahydroxycyklopentano-1-karboksylowy



(1*R*,2*S*,3*R*,4*S*,5*r*)-5-aminocyklopentano-1,2,3,4-tetraol

P-105 NUKLEOZYDY

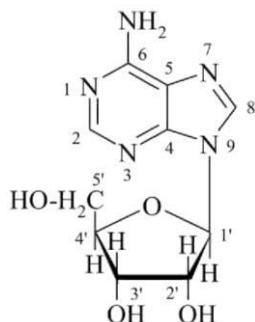
- | | |
|---------|-----------------------------|
| P-105.0 | Wprowadzenie |
| P-105.1 | Zachowane nazwy nukleozydów |
| P-105.2 | Podstawienie nukleozydów |

P-105.0 WPROWADZENIE

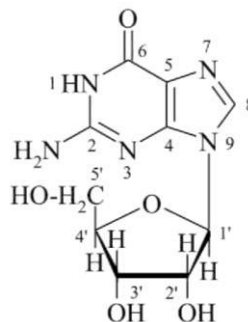
Nomenklatura nukleozydów jest zilustrowana w dokumencie zatytułowanym „Abbreviations and Symbols for Nucleic Acids, Polynucleotides and their Constituents” (lit. 47). Procedury nazywania pochodnych przedstawione w tym rozdziale są zgodne z zasadami opisanymi w rozdziale P-102, dotyczącymi modyfikacji w pierścieniu węglowodanowym oraz z ogólnymi regułami podstawienia związków organicznych.

P-105.1 ZACHOWANE NAZWY NUKLEOZYDÓW

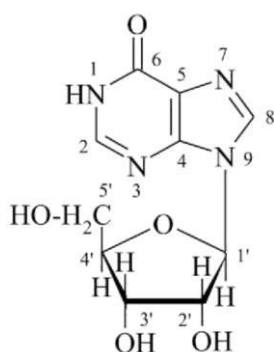
Poniższe nazwy są zachowane.



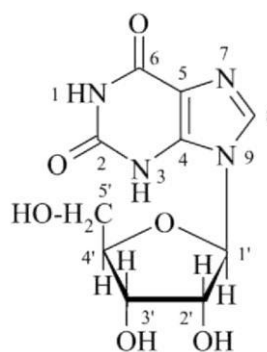
adenozyna



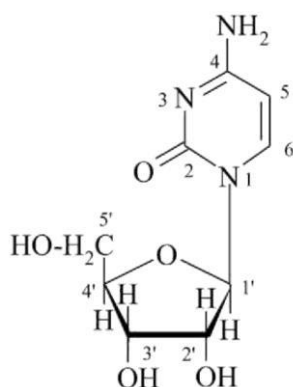
guanozyna



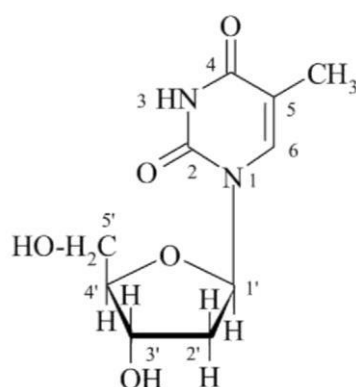
inozyna



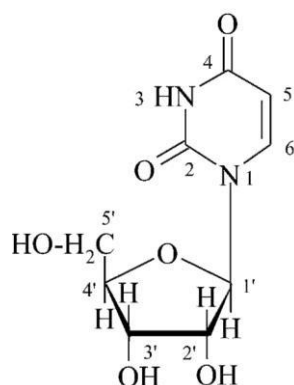
ksantozyna



cytydyna



tymidyna

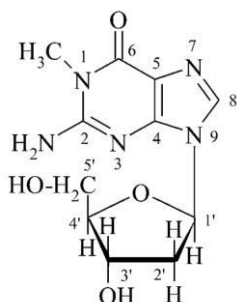


urydyna

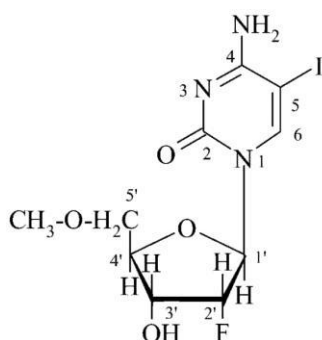
P-105.2 PODSTAWIENIE NUKLEOZYDÓW

P-105.2.1 Nukleozydy, które mają zachowane nazwy mogą być w pełni podstawiane w pierścieniu purynowym lub pirymidynowym. Zamianę grup okso w nukleozydach opisuje się za pomocą przedrostków zamiennych funkcji. Składnik rybofuranozyłowy można modyfikować zgodnie z zasadami opisanymi dla węglowodanów (patrz P-102.5).

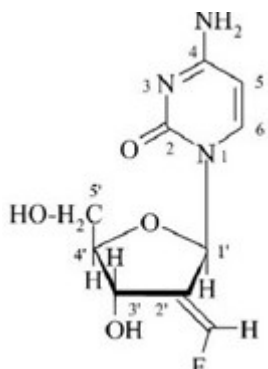
Przykłady:



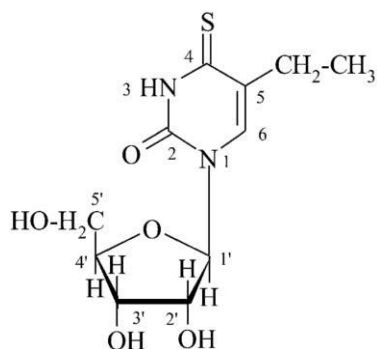
2'-deoksy-1-metyloguanozyna



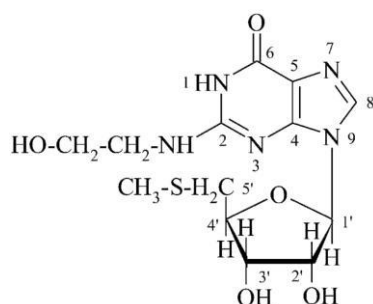
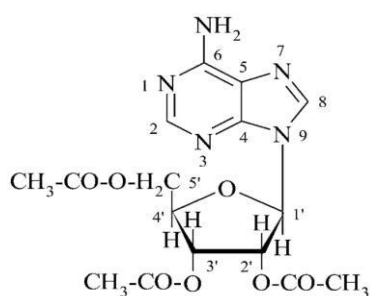
2'-deoksy-2'-fluoro-5-jodo-5'-*O*-metylocytydyna
(zastąpienie grupy hydroksylowej przez atom fluoru
w tej samej pozycji jest dozwolone)
4-amino-1-[(2*R*,3*R*,4*R*,5*R*)-3-fluoro-4-hydrokso-5-
(metoksymetylo)oksolan-2-ylo]-5-jodopirymidyn-2(1*H*)-on



(2*E'*)-2'-deoksy-2'-(fluorometylideno)cytydyna
4-amino-1-[(2*R*,3*E*,4*S*,5*R*)-3-(fluorometylideno)-4-
hydrokso-5-(hydroksymetylo)oksolan-2-ylo]pirymidyn-
2(1*H*)-on

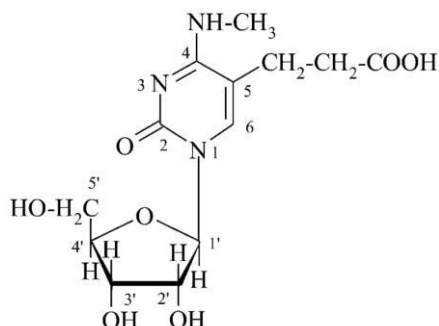


5-etylo-4-tiourydyna

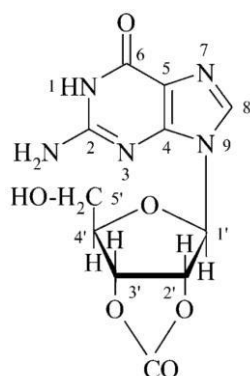
 N^2 -(2-hydroksyetylo)-5'-*S*-metylo-5'-tioguanozyna2',3',5'-tri-*O*-acetyloadenozyna
2',3',5'-trioctan adenzyny

P-105.2.2 W obecności grup charakterystycznych o wyższym priorytecie niż pseudoketon, stosuje się zwykle zasady nomenklatury podstawnikowej.

Przykłady:



kwas 3-[4-(metyloamino)-2-okso-1-β-D-rybofuranolilo]-1,2-dihydropirymidyn-5-ylo]propanowy



karbonian 2'3'-dideoksyguanozyno-2',3'-diylu (patrz P.101.7.4)
cykliczny-2',3'-karbonian guanozyny

P-106 NUKLEOTYDY

P-106.0 Wprowadzenie

P-106.1 Zachowane nazwy

P-106.2 Difosforany i trifosforany nukleotydów

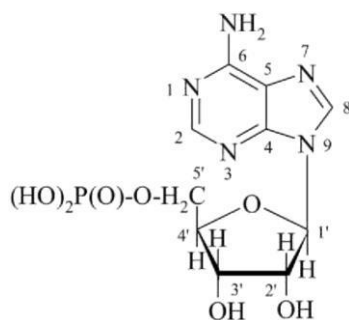
P-106.3 Pochodne nukleotydów

P-106.0 WPROWADZENIE

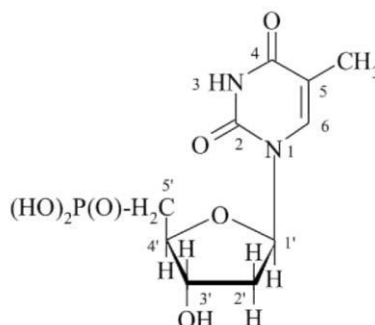
Nazwy nukleotydów są zilustrowane w dokumencie zatytułowanym „Abbreviations and Symbols for Nucleic Acids, Polynucleotides and their Constituents” (lit. 47). Procedury nazywania pochodnych przedstawionych w tym rozdziale są zgodne z zasadami opisanymi w rozdziale P-102, dotyczącymi modyfikacji na pierścieniu węglowodanowym oraz z ogólnymi regułami podstawienia związków organicznych.

P-106.1 ZACHOWANE NAZWY

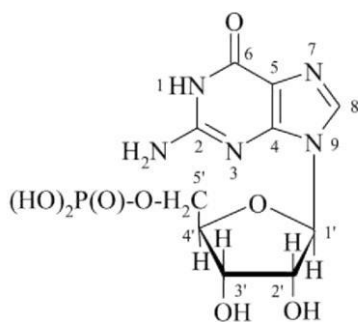
Poniżej przedstawiono zwyczajowe nazwy estrów nukleozydów z kwasem fosforowym. Primowany lokant składnika rybofuranozyłowego umieszcza się w celu wskazania pozycji grupy fosforanowej.



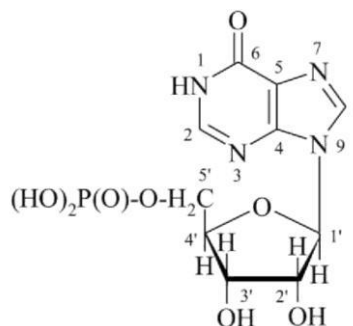
kwas 5'-adenylowy



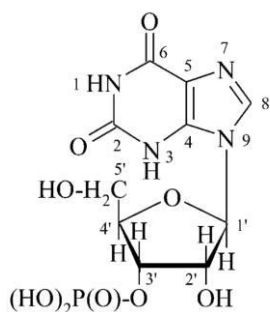
kwas 5'-tymidylowy



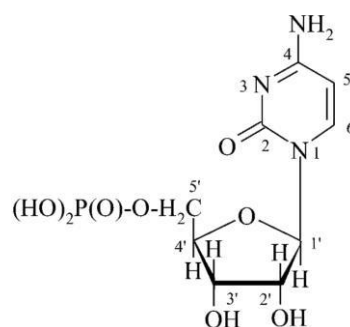
kwas 5'-guanylowy



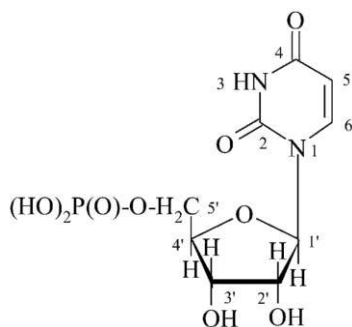
kwas 5'-inozynowy



kwas 3'-ksantylowy



kwas 5'-cytydylowy

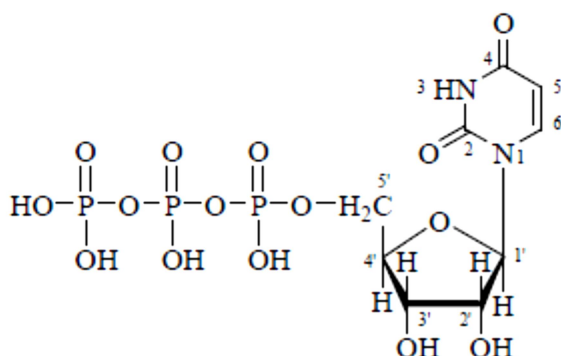


kwas 5'-urydylowy

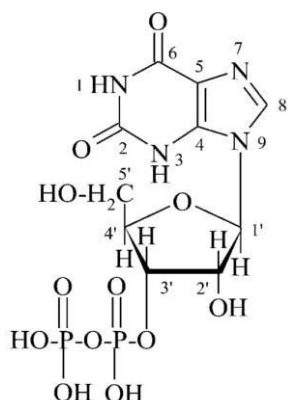
P-106.2 DIFOSFORANY I TRIFOSFORANY NUKLEOTYDÓW

Difosforan, trifosforan itp. estry nukleozydów nazywa się wymieniając określenie jak np. difosforan przed nazwą nukleozydu. Obecność atomów wodoru w difosforanowym, trifosforanowym itp. składniku nukleotydu wskazuje się przez dodanie słowa 'wodoru', 'diwodoru' itd. Aby uniknąć dwuznaczności stosuje się nawiasy

Przykłady:



5'-(trifosforan tetrawodoru) urydyny

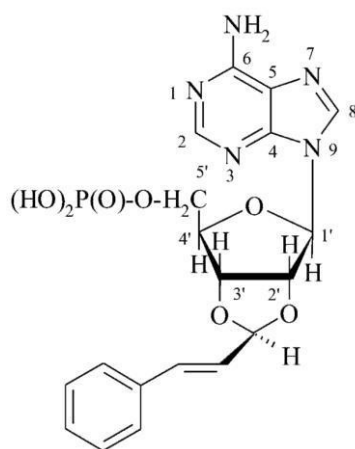


3'-(difosforan triwodoru) ksantozyny

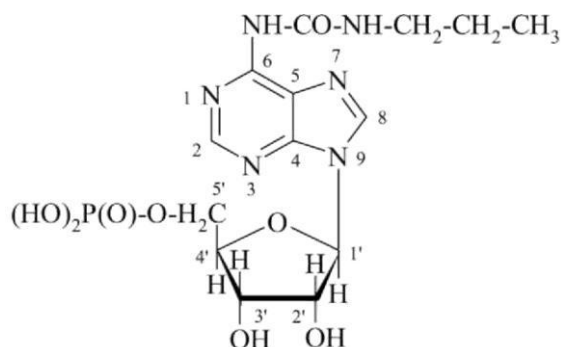
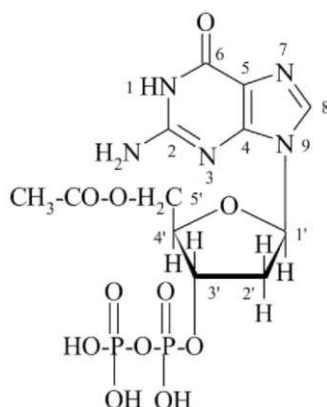
P-106.3 POCHODNE NUKLEOTYDÓW

P-106.3.1 Pochodne nukleotydów mających zachowane nazwy nazywa się w ten sam sposób jak odpowiednie nukleozydy, tj. mogą być w pełni podstawiane w pierścieniu purynowym lub pirymidynowym i reszta rybofuranozyłowa może być modyfikowana zgodnie z zasadami opisanymi dla węglowodanów (patrz P-102.5). Stosuje się również 2- i 3-deoksy modyfikowane reszty rybozy.

Przykłady:

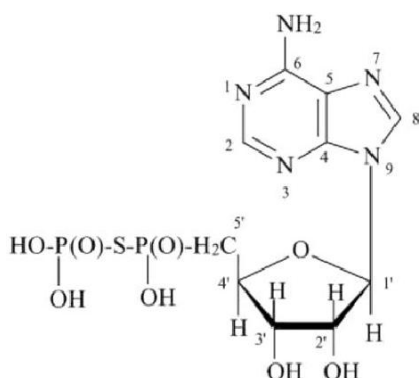


kwas 2',3'-O-[(1*S*,2*E*)-3-fenyloprop-2-eno-1,1-diyl]-5'-adenylowy

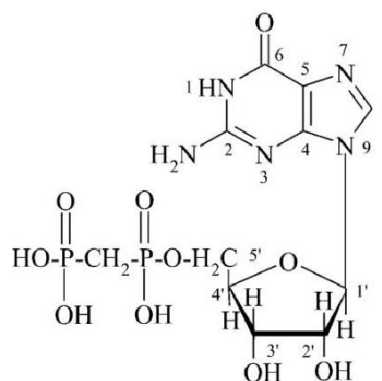
kwas N^6 -(propylokarbamoilo)-5'-adenylowy3'-(difosforan triwodoru) 5'-*O*-acetylo-2'-deoksyguanozyny
3'-(difosforan triwodoru)-5'-octan 2'-deoksyguanozyny

P-106.3.2 Analogi di- i polifosforanów nukleozydów można nazywać metodami zamiany funkcji mających zastosowanie do kwasów di- i polifosforowych (patrz P-67.2).

Przykłady:

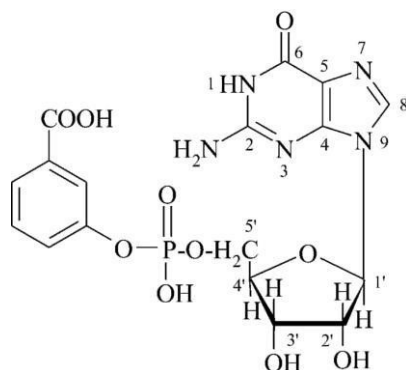


5'-(2-tiodifosforan triwodoru) adenozyne

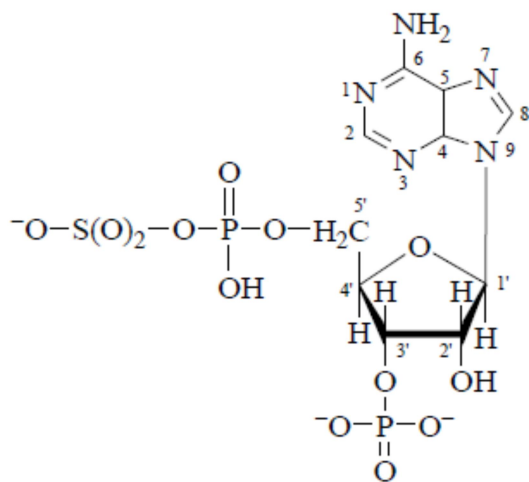
5'-[(fosfonometylo)fosfonian wodoru] guanozyny
5'-(metylenodifosfonian triwodoru) guanozyny
5'-(2-karbadifosforan triwodoru) guanozyny
(ta nazwa zachowuje integralność nazw nukleotydu; patrz P.101.4.3)

P-106.3.3 W obecności grup charakterystycznych o wyższym priorytecie niż reszta kwasu fosforowego, stosuje się zwykle zasady nomenklatury podstawnikowej. Nazwy przedrostków podstawnikowych wywodzi się z nazw zwyczajowych monofosforanów nukleotydów pomijając słowo 'kwas' i zamieniając końcówkę '-owy' na '-ilo' np. adenylilo, cytydylilo. Należy zwrócić uwagę, że nazwa przedrostka podstawnikowego wywodząca się od kwasu inozynowego jest wyjątkiem; nazywany jest inozynylil, tak że końcówka jest jak inne przedrostki podstawnikowe wywodzące się z nazw zwyczajowych monofosforanów nukleotydów.

Przykłady:



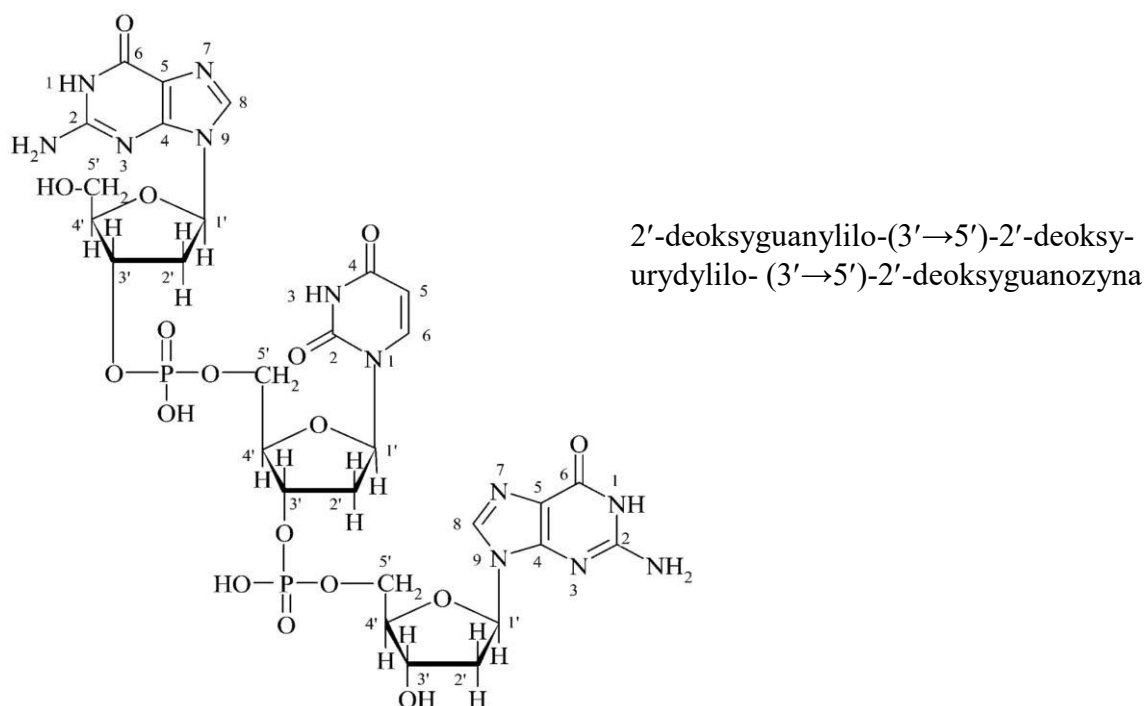
kwas 3-(5'-guanyliloksy)benzoesowy



siarczan 3'-O-fosfoniano-5'-adenylilu
siarczan 3'-fosfo-5'-adenylilu

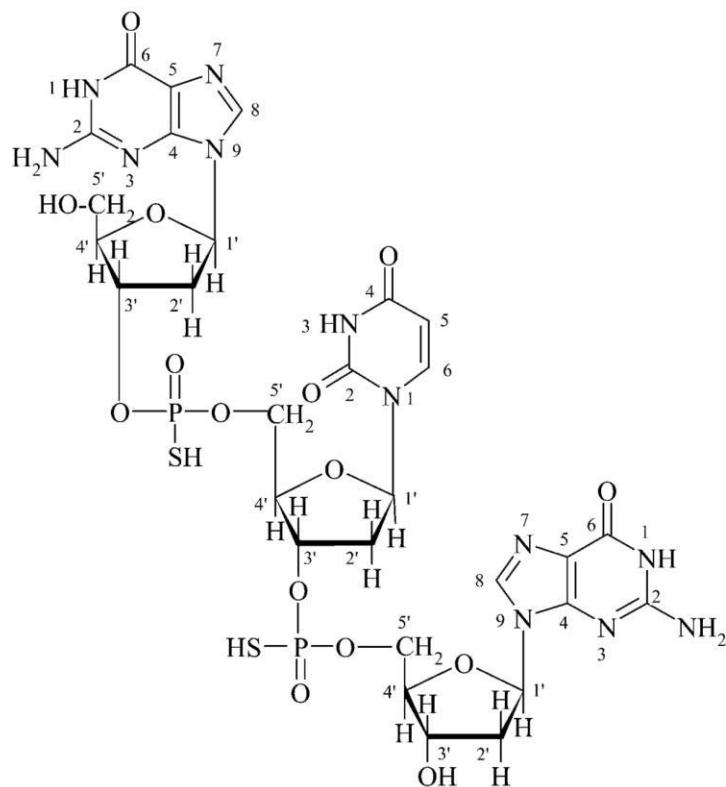
P-106.3.4 Nazwy oligonukleotydów tworzy się używając przedrostków wywodzących się z nazw zwyczajowych nukleotydów.

Przykład:



P-106.3.5 Gdy obecny jest kwas fosforotowy (HS-P w miejscu HO-P), to przed nazwą nukleotydu dodaje się przedrostek *P*-tio.

Przykład:



2'-deoksy-*P*-tioguanylylo-(3'→5')-2'-deoksy-*P*-tiourydylylo-(3'→5')-2'-deoksyguanozyna

P-107 LIPIDY

P-107.0 Wprowadzenie

P-107.1 Definicje

P-107.2 Glicerydy

P-107.3 Kwasy fosfatydowe

P-107.4 Glikolipidy

P-107.0 WPROWADZENIE

Nomenklatura lipidów, fosfolipidów i glikolipidów została opublikowana w 1976 r. (lit. 48); nomenklatura glikolipidów została zaktualizowana w 1997 r. (lit. 50).

P-107.1 DEFINICJE

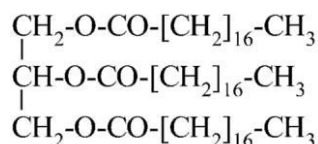
‘Lipidy’ są luźno zdefiniowanym terminem dla substancji pochodzenia biologicznego, które są rozpuszczalne w niepolarnych rozpuszczalnikach. Do lipidów należą substancje, które ulegają zmydleniu, jak np. ‘glicerydy’ (tłuszcze i oleje) i ‘fosfolipidy’, jak również substancje niezmydlające się, w szczególności ‘steroidy’.

Nomenklatura lipidów, podobnie jak węglowodanów, składa się z zachowanych nazw i nazw systematycznych, tworzonych w ramach specjalistycznej nomenklatury lipidów. W nomenklaturze lipidów zachowana jest nazwa ‘sfinganina’ dla ‘(2*S*,3*R*)-2-aminooktadekano-1,3-diolu’ i jego pochodnych.

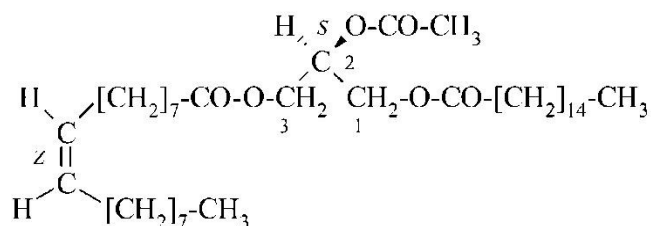
P-107.2 GLICERYDY

Glicerydy są estrami glicerolu (propano-1,2,3-triolu) z kwasami tłuszczowymi. Od dawna są one zwyczajowo podzielone na triglicerydy, 1,2- lub 1,3-diglicerydy i 1- lub 2-monoglicerydy, w zależności od liczby i pozycji grup acylowych. Poszczególne glicerydy są nazywane mono-, di- lub tri-*O*-acyloglicerolami. Stosowanie nazwy glicerol jest dozwolone w ogólnej nomenklaturze związków organicznych. Nazwa ta jest także zachowana w nomenklaturze produktów naturalnych, zwłaszcza lipidów.

Przykłady:



tri-*O*-oktadekanoiloglicerol
 trioktadekanian propano-1,2,3-triolu



(2*S*)-2-*O*-acetylo-1-*O*-heksadekanoilo-3-*O*-[(9*Z*)-oktadec-9-enoilo]glicerol
(numeracja pokazana)

(2*S*)-2-*O*-acetylo-1-*O*-oleinoilo-3-*O*-palmitoiloglicerol

1-heksadekanian 2-octan 3-[(9*Z*)-oktadec-9-enian] (2*S*)-propano-1,2,3-triylu

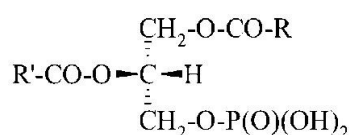
Fosfolipidy są lipidami zawierającymi kwas fosforowy w postaci mono- lub diestrów, łącznie z ‘kwasami fosfatydowymi’ i ‘fosfoglicerydami’.

Kwasy fosfatydowe są pochodnymi glicerolu w którym jedna grupa hydroksylowa, zazwyczaj ale niekoniecznie pierwszorzędowa, jest zestryfikowana kwasem fosforowym, a pozostałe dwie grupy hydroksylowe są zestryfikowane kwasami tłuszczowymi.

Fosfoglicerydy są fosforowymi diestrami, estrami kwasu fosfatydowego, w których zestryfikowanym alkoholem, na ogół posiadającym grupę polarną (-OH lub NH₂), jest zazwyczaj 2-aminoetanol (nie ‘etanoloamina’), cholina, glicerol, inozytol lub seryna. Termin ten obejmuje ‘lecytyny’ i ‘kefaliny’.

P-107.3 KWASY FOSFATYDOWE

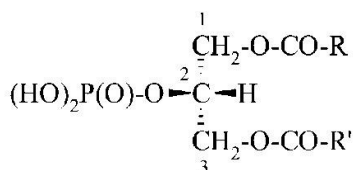
P-107.3.1 Ogólna struktura kwasów fosfatydowych jest następująca:



kwas 3-*sn*-fosfatydowy

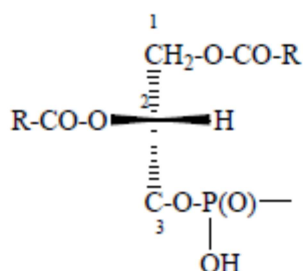
(omówienie i przykłady zastosowania ‘*sn*’
patrz P-107.3.2)

Na ogół, kwasy 3-*sn*-fosfatydowe nazywa się po prostu kwasami fosfatydowymi.



kwas 2-fosfatydowy

Monowalencyjna grupa acylowa ma zachowaną nazwę ‘fosfatydyl’.



fosfatydyl

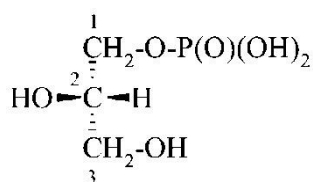
P-107.3.2 Konfiguracja kwasów fosfatydowych

W celu określenia konfiguracji absolutnej pochodnych glicerolu, atomy węgla glicerolu numerowane są metodą zwaną ‘stereospecyficzną numeracją’. Atom węgla, znajdujący się u góry w projekcji Fischera, w której łańcuch węglowy zapisuje się pionowo, oznacza się jako C-1, jeśli grupa hydroksylowa przy atomie węgla 2 jest rzutowana na lewo.

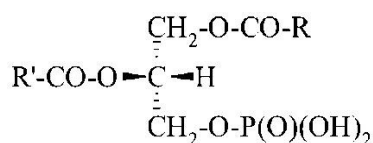
W celu odróżnienia tej numeracji od numeracji tradycyjnej, która nie przedstawia relacji przestrzennych, stosowany jest stereodeskryptor 'sn' (dla 'stereospecyficznej numeracji').

Deskryptor ten umieszcza się z łącznikiem bezpośrednio przed słowem glicerol i zapisuje kursywą, małymi literami, nawet na początku zdania. Racematy oznacza się stereodeskryptorem ‘rac’, a stereodeskryptor ‘Ξ’ może być stosowany jeśli konfiguracja związku jest nieznana lub nieokreślona.

Przykłady:



1-fosforan *sn*-glicerolu
fosforan diwodoru (2*S*)-2,3-dihidroksypropylu

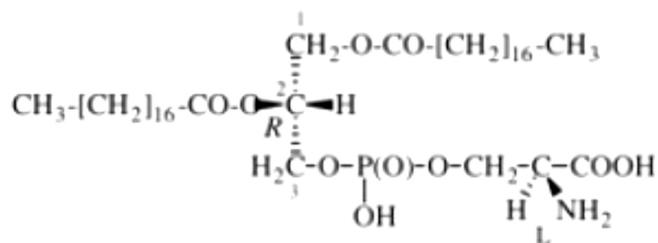


3-fosforan *sn*-glicerolu
fosforan diwodoru (2*R*)-2,3-dihidroksypropylu

P-107.3.3 Fosfatydyloseryny

Termin ‘fosfatydyloseryny’ jest stosowany w celu opisanego pochodnych kwasów fosfatydowych, w których reszta fosforanowa jest zestryfikowana aminokwasem ‘seryną’, zazwyczaj L-seryną. Semi-systematyczne nazwy określonych związków tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

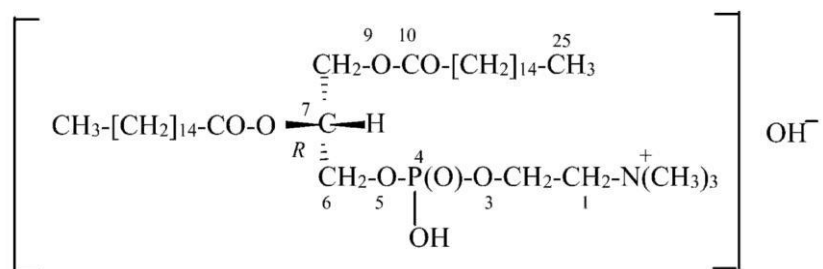


1,2-di(oktadekanoilo)-*sn*-glicero-3-fosfo-L-seryna
O-{[(2*R*)-2,3-di(oktadekanoiloksy)propoksy]hydroksyfosforylo}-L-seryna

P-107.3.4 Fosfatydylocholiny

Termin ‘fosfatydylocholiny’ jest stosowany w celu opisanie pochodnych kwasów fosfatydowych, w których reszta fosforanowa jest zestryfikowana choliną. Semi-systematyczne nazwy określonych związków tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

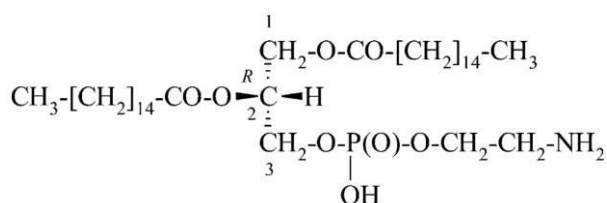


hydroksyd (7*R*)-7-(heksadekanoiloksy)-4-hydroksy-*N,N,N*-trimetylo-4,10-dioks-3,5,9-trioksa-4λ⁵-fosfapentakozano-1-aminium

P-107.3.5 Fosfatydyloetanolaminy

Termin ‘fosfatydyloetanolaminy’ [bardziej poprawnie określane jako ‘fosfatydylo(amino)etanole’] jest stosowany w celu opisanie pochodnych kwasów fosfatydowych, w których reszta fosforanowa jest zestryfikowana 2-aminoetanolem. Semi-systematyczne nazwy określonych związków tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

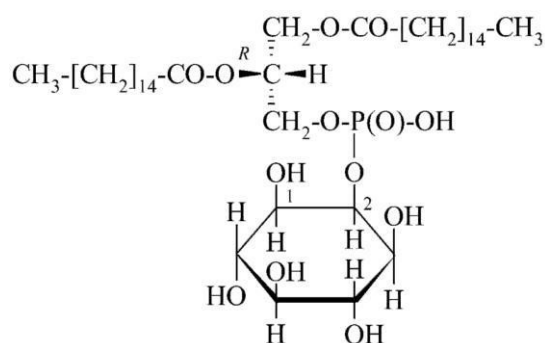


1,2-di(heksadekanoilo)-*sn*-glicero-3-fosfoetanolamina
diheksadekanian (2*R*)-3-{[(2-aminoetoksy)hydroksyfosforylo]oksy}propano-1,2-diylu

P-107.3.6 Fosfatydyloinozytole

Termin ‘fosfatydyloinozytole’ jest stosowany w celu opisanie pochodnych kwasów fosfatydowych, w których reszta fosforanowa jest zestryfikowana cząsteczką inozytolu. Semi-systematyczne nazwy określonych związków tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:



2-[fosforan wodoru (2*R*)-2,3-bis(heksadekanoiloksy)propylu] *L-mio*-inozytolu diheksadekanian (2*R*)-3-[(hydroksy{[(1*S*,2*R*,3*R*,4*S*,5*S*,6*S*)-2,3,4,5,6-pentahydroksy-cykloheksylo]oksy} fosforylo)oksy]propano-1,2-diylu

P-107.4 GLIKOLIPIDY

P-107.4.1 Definicje

Określenie ‘glikolipid’ oznacza każdy związek zawierający jedną lub większą liczbę reszt monosacharydowych połączonych wiązaniem glikozydowym z ugrupowaniem hydrofobowym, takim jak acyloglicerol, sfingoid (długołańcuchowy alifatyczny aminoalkohol), ceramid (*N*-acylosfingoid) lub prenylofosforan.

Glikoglicerolipidy są glikolipidami zawierającymi jedną lub większą liczbę reszt glicerolu.

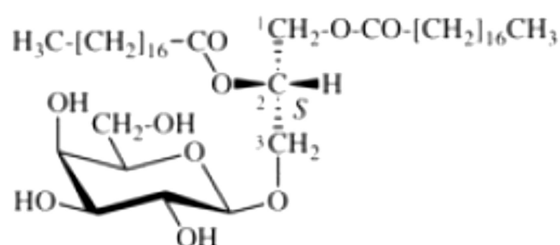
Glikosfingolipidy oznaczają lipidy zawierające co najmniej jedną resztę monosacharydową i sfingoid lub ceramid.

Określenie ‘glikofosfatydyloinozytol’ oznacza glikolipidy zawierające cukry połączone glikozydowo z resztą inozytolu będącego składnikiem fosfatydyloinozytoli.

Określone związki nazywa się systematycznie.

P-107.4.2 Glikoglicerolipidy

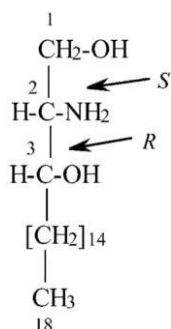
Określone związki nazywane są na podstawie macierzystego glicerolu; ich konfiguracja jest specyficznie numerowana jak pokazano w P-107.3.2.



3-*O*-β-*D*-galaktopiranozylo-1,2-di-*O*-oktadekanoilo-*sn*-glicerol dioktadekanian (2*S*)-3-(β-*D*-galaktopiranozyloksy)propano-1,2-diylu

P-107.4.3 Glikosfingolipidy

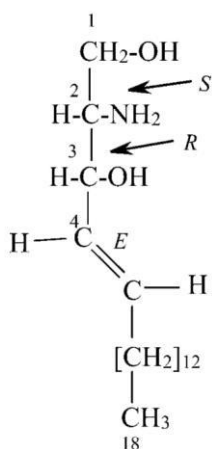
P-107.4.3.1 Nazwy glikosfingolipidów tworzone są przez zastosowanie zachowanej nazwy ‘sfinganina’ dla alifatycznego aminoalkoholu mającego określoną konfigurację absolutną. Zachowana nazwa ‘sfinganina’ jest preferowana dla związku o nazwie systematycznej (2*S*,3*R*)-2-aminooktadekano-1,3-diol.



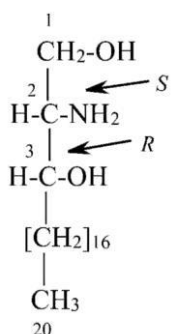
sfinganina
(2*S*,3*R*)-2-aminooktadekano-1,3-diol

Zachowana nazwa ‘sfinganina’ jest stosowana do tworzenia nazw nienasyconych i *N*-podstawionych pochodnych jak i pochodnych *O*-podstawionych. Inne pochodne, takie jak hydroksy, okso i aminopochodne jak również izomery o innej długości łańcucha lub inne diastereoizomery nazywa się systematycznie w oparciu o zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej.

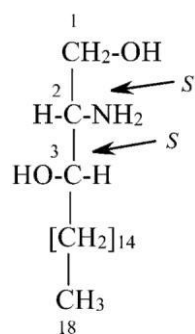
Przykłady:



(4*E*)-sfing-4-enina
(2*S*,3*R*,4*E*)-2-aminooktadec-4-eno-1,3-diol

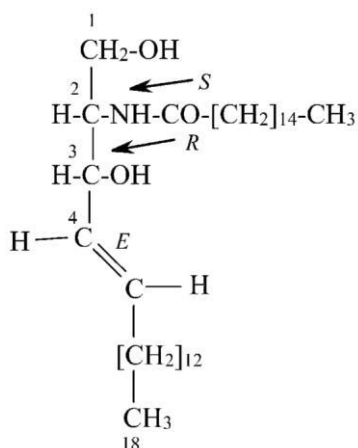


ikozasfinganina
(2*S*,3*R*)-2-aminoikozano-1,3-diol

(2*S*,3*S*)-2-aminooktadekano-1,3-diol**P-107.4.3.2** Ceramidy

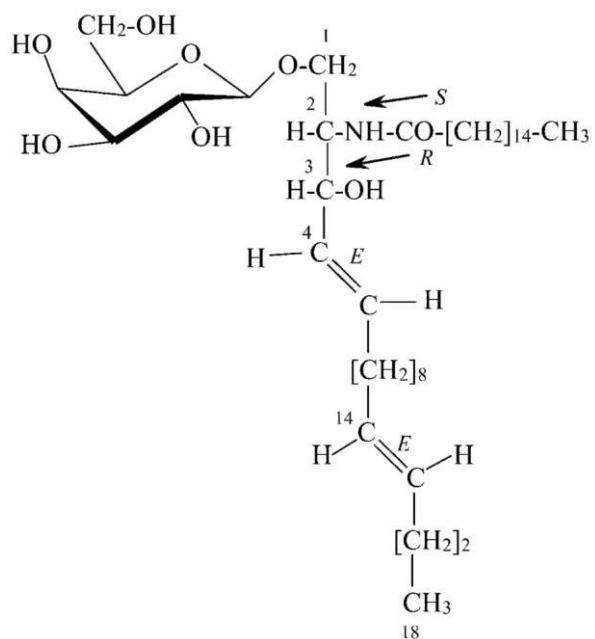
Ceramidy są *N*-acylosfingoidami.

Przykład:

(4*E*)-*N*-heksadekanoilosfing-4-enina
N-[(2*S*,3*R*,4*E*)-1,3-dihydroksoyktadec-4-en-2-yl]heksadekanoamid**P-107.4.3.3** Obojętne glikosfingolipidy

Obojętny glikosfingolipid jest pochodną sfingoidu lub ceramidu zawierającą resztę węglowodanową. Uznaje się, że reszta węglowodanowa przyłączona jest wiązaniem glikozydowym do 1-*O*-. Preferowane nazwy systematyczne muszą zawierać wszystkie lokanty.

Przykład:



(4*E*,14*E*)-1-*O*-(β-D-galaktopiranozylo)-*N*-heksadekanoilosfinga-4,14-dienina
N-[(2*S*,3*R*,4*E*,14*E*)-1-(β-D-galaktopiranozyloksy)-3-hidroksyoktadeka-4,14-dien-2-
 ylo]heksadekanoamid