

Preâmbulo

As presentes recomendações expandem e substituem a proposta de regras de nomenclatura de hidratos de carbono (*bras.* carboidratos) [1] publicada em 1969 conjuntamente pela Comissão IUPAC de Nomenclatura de Química Orgânica e pela Comissão IUPAC-IUB de Nomenclatura em Bioquímica e reimpressa em [2]. Substituem também outras recomendações já publicadas [3-7] para áreas mais especializadas da Química de Hidratos de Carbono (*bras.* Carboidratos). No entanto estes documentos podem servir para a consulta de mais exemplos para além dos citados no presente documento. As seguintes recomendações, embora não estejam contempladas no mesmo, também são relevantes para o domínio em questão:

- Nomenclatura de ciclitóis, 1973 [8]
- Numeração dos átomos no *mio*-inositol, 1988 [9]
- Símbolos para especificar a conformação de cadeias de polissacáridos (*bras.* polissacarídeos), 1981 [10]
- Nomenclatura de glicoproteínas, de glicopéptidos (*bras.* glicopeptídeos) e de peptidoglicanos, 1985 [11]
- Nomenclatura de glicolípidos (*bras.* glicolipídeos) [12]

As presentes recomendações tratam dos nomes de formas acíclicas e cíclicas de monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) e seus derivados simples, bem como da nomenclatura de oligossacáridos (*bras.* oligossacarídeos) e de polissacáridos (*bras.* polissacarídeos). São complementares às Regras Definitivas de Nomenclatura de Química Orgânica [13,14] e pretendem abranger aspectos da nomenclatura de hidratos de carbono (*bras.* carboidratos), que não estejam contemplados por aquelas regras.

2-Carb-0. Desenvolvimento histórico da nomenclatura de hidratos de carbono (*bras.* carboidratos) [15]

2-Carb-0.1. Primeiras abordagens

No princípio do século XIX, cada açúcar era designado frequentemente segundo a sua fonte, por exemplo, açúcar das uvas (*grape sugar, Traubenzucker*)* no caso da glucose e açúcar de cana (*cane sugar, Rohrzucker*)* no caso da sacarose (o nome sucrose apareceu muito mais tarde). O nome glucose surgiu em 1838. Kekulé propôs em 1866 o nome “dextrose” porque a glucose é dextrorotatória. O açúcar da fruta, a frutose (*fructose, Fruchtzucker*)* foi durante algum tempo designado “levulose” (*laevulose*, embora na ortografia americana, por ser levorotatório, seja “*levulose*”, *Laevulose*)*. Cedo se chegou ao consenso de que os açúcares deviam ter nomes terminados em ose, e criou-se o termo celulose por combinação com a palavra francesa *cellule* para célula, tendo sido criado mesmo antes de se conhecer a sua estrutura química. O termo “hidrato de carbono” (*bras.* “carboidrato”) (do francês *hydrate de carbone*) foi aplicado originalmente aos monossacáridos (*bras.* monossacarídeos), em reconhecimento do facto da sua composição empírica poder ser expressa como $C_n(H_2O)_n$. Este termo é agora utilizado genericamente com um sentido mais lato (vd. 2-Carb-1.1).

* Nota dos tradutores: Entre parênteses indicam-se primeiramente o nome em inglês e seguidamente em alemão.

2-Carb-0.2. A contribuição de Emil Fischer

Emil Fischer [16] iniciou os seus estudos sobre hidratos de carbono (*bras.* carboidratos) em 1880. Ao longo de dez anos ele foi capaz de atribuir as configurações relativas à maioria dos açúcares mais conhecidos, tendo além disso sintetizado muitos deles. Isto levou à necessidade de dar nomes a estes compostos. Fischer e outros autores lançaram os fundamentos da terminologia ainda hoje em uso, baseada nos termos triose, tetrose, pentose, e hexose. Adoptou a proposta de Armstrong de classificar os açúcares em aldoses e cetoses, e propôs o nome frutose para levulose, por ter reconhecido que o sinal da rotação óptica não era um critério adequado para agrupar os açúcares em famílias.

A estereoquímica, desenvolvida desde 1874 por van't Hoff e Le Bel, teve um grande impacto na química de hidratos de carbono porque explicava facilmente as isomerias observadas. Emil Fischer introduziu as fórmulas de projecção clássicas para os açúcares, correspondentes a uma orientação-padrão (cadeia de átomos de carbono na vertical, grupo carbonilo no topo). Como usava modelos com ligações flexíveis entre os átomos, podia facilmente esticar os mesmos de forma a torná-los adequados à projecção. Fischer atribuiu à glucose dextrorrotatória (por via do ácido glucárico dela derivado) a projecção com o grupo OH em C-5 apontando para a direita, sabendo bem que tinha uma probabilidade de 50% desta atribuição se revelar errada. Muito mais tarde provou-se que estava correcta em sentido absoluto (Bijvoet, 1951).

Rosanoff em 1906 escolheu os gliceraldeídos enantiómeros (*bras.* enantiômeros) como referência. Qualquer açúcar derivável de D-gliceraldeído por prolongamento da cadeia carbonada pertence à serie D, convenção esta ainda em uso.

2-Carb-0.3. Formas cíclicas

No final do século XIX verificou-se que não só os glicósidos (*bras.* glicosídeos) existiam na forma cíclica mas também os açúcares livres, como hemiacetais ou hemicetais. A mutarrotação, descoberta em 1846 por Dubrunfaut, foi então interpretada como sendo uma alteração da configuração do átomo de carbono glicosídico (anomérico). Emil Fischer propôs que a forma cíclica devia ser um anel de cinco membros, que foi designado por Tollens pelo símbolo <1,4>, enquanto o anel de seis membros ficou indicado pelo símbolo <1,5>.

Em 1920, Haworth e a sua escola propuseram os termos “furanose” e “piranose” para estas duas formas. Haworth introduziu também a “representação de Haworth” para escrever a fórmula estrutural, uma convenção que foi de imediato largamente seguida.

2-Carb-0.4. Comissões de nomenclatura

Até à década de 1940, as propostas de nomenclatura tinham sido feitas por pessoas singulares. Nalguns casos estas foram seguidas pela comunidade científica e noutros casos não. Entidades oficiais como a União Internacional de Química, embora desenvolvendo e expandindo a Nomenclatura de Genebra para compostos orgânicos, pouco progrediram na nomenclatura de hidratos de carbono (*bras.* carboidratos). A Comissão de Nomenclatura de Química Biológica da IUPAC propôs um esquema de

classificação para os hidratos de carbono (*bras.* carboidratos), mas os novos termos propostos não sobreviveram. Entretanto em 1939 a Sociedade Americana de Química (*American Chemical Society - ACS*) tinha formado uma comissão para examinar esta questão, visto que o progresso rápido neste campo tinha levado ao aparecimento de incoerências devidas à ausência de directrizes. Esta comissão apresentou os princípios para a nomenclatura sistemática moderna dos hidratos de carbono (*bras.* carboidratos) e seus derivados: numeração da cadeia do açúcar, utilização de D e L, e α e β , e a designação da estereoquímica pelos prefixos em itálico (prefixos múltiplos para cadeias mais longas). Surgiram algumas comunicações preliminares e o relatório final, preparado por M. L. Wolfrom, foi aprovado pelo Conselho da ACS e publicado em 1948 [17].

No entanto nem todos os problemas foram resolvidos, e além disso surgiram práticas divergentes dos dois lados do Atlântico. Foi constituída uma comissão conjunta Britânico-Americana, que publicou as Regras para a Nomenclatura de Hidratos de carbono (*bras.* Carboidratos) em 1952 [18]. Este trabalho foi continuado e a Sociedade Americana de Química e a Sociedade de Química Britânica subscreveram e publicaram uma versão revista em 1963 [19]. A publicação desta versão levou a Comissão IUPAC de Nomenclatura em Química Orgânica a considerar a preparação de um conjunto de Regras IUPAC para a nomenclatura de hidratos de carbono (*bras.* carboidratos). Isto foi feito em conjunto com a Comissão IUPAC-IUB de Nomenclatura em Bioquímica, e resultou na publicação de “Proposta de Regras para a Nomenclatura de Hidratos de Carbono, Parte 1, 1969” em 1971/72 em várias revistas [1]. Apresenta-se agora uma revisão do documento de 1971. No presente documento, as recomendações são designadas 2-Carb-n, para as distinguir das recomendações Carb-n da publicação anterior.

2-Carb-1. Definições e convenções

2-Carb-1.1. Hidratos de carbono (*bras.* carboidratos)

O termo genérico “hidrato de carbono” (*bras.* carboidrato) inclui monossacáridos (*bras.* monossacarídeos), oligossacáridos (*bras.* oligossacarídeos) e polissacáridos (*bras.* polissacarídeos), bem como substâncias derivadas de monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) por redução do grupo carbonilo (*bras.* carbonila) (alditóis), ou por oxidação de um ou mais grupos terminais a grupos carboxilo (*bras.* carboxila), ou ainda por troca de um ou mais grupos hidroxilo (*bras.* hidroxila) por um átomo de hidrogénio (*bras.* hidrogénio), por um grupo aminogénio (*bras.* aminogénio), por um grupo tiol ou por outros grupos heteroatómicos (*bras.* heteroatómicos) semelhantes. Também inclui derivados destes compostos. O termo ‘açúcar’ é frequentemente aplicado a monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) e oligossacáridos (*bras.* oligossacarídeos) inferiores. É digno de nota que cerca de 3% dos compostos listados pelo *Chemical Abstract Service* (i.e. mais do que 360.000 compostos) têm nomes obtidos pelos métodos de nomenclatura de hidratos de carbono (*bras.* carboidratos).

Nota: Ciclitóis, em geral, não são considerados hidratos de carbono (*bras.* carboidratos). A sua nomenclatura é objecto de outras recomendações [8,9].

2-Carb-1.2. Monossacáridos (*bras.* monossacarídeos)

Os monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) parentais são aldeídos poli-hidroxiados $H-[CHOH]_n-CHO$ ou cetonas poli-hidroxiadas $H-[CHOH]_n-CO-[CHOH]_m-H$ com três ou mais átomos de carbono.

O termo genérico monossacárido (*bras.* monossacarídeo) (contrariamente a oligossacárido ou polissacárido) (*bras.* oligossacarídeo ou polissacarídeo) refere-se a uma unidade singular sem ligação glicosídica a outras tais unidades. Inclui aldoses, dialdoses, aldocetoses, cetoses e dicetoses, bem como desoxiaçúcares, aminoaçúcares, e seus derivados, que possuam no composto parental um grupo carbonilo (*bras.* carbonila) (potencial).

1.2.1. Aldoses e cetoses

Os monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) com um grupo carbonilo (*bras.* carbonila) aldeídico, mesmo que apenas potencial, chamam-se aldoses e os que possuem um grupo carbonilo cetônico (*bras.* carbonila cetônica), mesmo que apenas potencial, chamam-se cetoses.

Nota. O termo grupo carbonilo (*bras.* carbonila) aldeídico potencial refere-se ao grupo hemiacetal resultante do fecho do anel. Analogamente o termo grupo carbonilo cetônico (*bras.* carbonila cetônica) potencial refere-se à estrutura de um hemicetal cíclico (vd. 2-Carb-5).

1.2.2. Formas cíclicas

Os hemiacetais ou hemicetais cíclicos de açúcares com um anel de 5 membros (tetra-hidrofurano) chamam-se furanoses e com um anel de seis membros (tetra-hidropirano) chamam-se piranoses. Para açúcares com outros tamanhos de anel, vd. 2-Carb-5.

2-Carb-1.3. Dialdoses

Monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) contendo dois grupos carbonilo (*bras.* carbonila) aldeídicos, mesmo que apenas potenciais, chamam-se dialdoses (vd. 2-Carb-9).

2-Carb-1.4. Dicetoses

Monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) contendo dois grupos carbonilo cetônicos (*bras.* carbonila cetônicas) (mesmo que apenas potenciais) chamam-se dicetoses (vd. 2-Carb-11).

2-Carb-1.5. Cetoaldoses (aldocetoses, aldulososes)

Monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) contendo um grupo carbonilo (*bras.* carbonila) aldeídico, mesmo que apenas potencial e um grupo carbonilo cetônico (*bras.*

carbonila cetônica), mesmo que apenas potencial, chamam-se cetoaldoses (vd. 2-Carb-12); este termo é preferido às alternativas baseadas em 2-Carb-2.1.1 (aldose é preferido a cetose).

2-Carb-1.6. Desoxiaçúcares

Monossacáridos (*bras.* monossacarídeos) nos quais um grupo hidroxilo (*bras.* hidroxila) se encontra trocado por um átomo de hidrogênio (*bras.* hidrogênio) chamam-se desoxiaçúcares (vd. 2-Carb-13).

2-Carb-1.7. Aminoaçúcares

Monossacáridos (*bras.* monossacarídeos), nos quais um grupo hidroxilo (*bras.* hidroxila) alcoólico se encontra trocado por um grupo aminogênio (*bras.* aminogênio), chamam-se aminoaçúcares (vd. 2-Carb-14). Quando o grupo hidroxilo (*bras.* hidroxila) hemiacetálico estiver trocado por um átomo de hidrogênio (*bras.* hidrogênio), estes compostos chamam-se glicosilaminas.

2-Carb-1.8. Alditóis

Álcoois poli-hidrícos, derivados formalmente pela permuta de um grupo carbonilo (*bras.* carbonila) no monossacárido (*bras.* monossacarídeo) por um grupo CHOH, chamam-se alditóis (vd. 2-Carb-19).

2-Carb-1.9. Ácidos aldônicos (*bras.* aldônicos)

Ácidos monocarboxílicos, derivados formalmente de aldoses por permuta do grupo aldeídico por um grupo carboxilo (*bras.* carboxila), chamam-se ácidos aldônicos (*bras.* aldônicos) (vd. 2-Carb-20).

2-Carb-1.10. Ácidos cetoaldônicos (*bras.* cetoaldônicos)

Ácidos oxocarboxílicos, derivados formalmente dos ácidos aldônicos (*bras.* aldônicos) por permuta do grupo CHOH por um grupo carbonilo (*bras.* carbonila), chamam-se ácidos cetoaldônicos (*bras.* cetoaldônicos) (vd. 2-Carb-21).

2-Carb-1.11. Ácidos urônicos (*bras.* urônicos)

Ácidos monocarboxílicos derivados formalmente de aldoses por permuta do grupo CH₂OH por um grupo carboxilo (*bras.* carboxila), chamam-se ácidos urônicos (*bras.* urônicos) (vd. 2-Carb-22).

2-Carb-1.12. Ácidos aldáricos

Ácidos dicarboxílicos, derivados formalmente de aldoses por permuta dos dois grupos terminais (CHO e CH₂OH) por grupos carboxilo (*bras.* carboxila), chamam-se ácidos aldáricos (vd. 2-Carb-23).

2-Carb-1.13. Glicósidos (*bras.* glicosídeos)

Glicósidos (*bras.* glicosídeos) são acetais mistos derivados formalmente por eliminação de água entre um grupo hidroxilo (*bras.* hidroxila) hemiacetálico ou hemicetálico de um açúcar e um grupo hidroxilo (*bras.* hidroxila) de um segundo composto. A ligação entre as duas unidades chama-se ligação glicosídica. Acerca da extensão desta definição, vd. 2-Carb-33.

2-Carb-1.14. Oligossacáridos (*bras.* oligossacarídeos)

Oligossacáridos (*bras.* oligossacarídeos) são compostos nos quais as unidades de monossacárido (*bras.* monossacarídeo) estão unidas entre si por ligações glicosídicas. De acordo com o número de unidades chamam-se dissacáridos, trissacáridos, tetrassacáridos, pentassacáridos (*bras.* dissacarídeos, trissacarídeos, tetrassacarídeos, pentassacarídeos), etc. A distinção relativamente aos polissacáridos (*bras.* polissacarídeos) não é muito nítida, no entanto o termo oligossacárido (*bras.* oligossacarídeo) é utilizado geralmente para uma estrutura definida, enquanto que polissacárido é utilizado para polímeros com cadeias de comprimento não especificado ou para misturas homólogas. Quando as ligações são de outro tipo, os compostos são designados análogos de oligossacáridos (*bras.* oligossacarídeos) (vd. 2-Carb-37).

Nota. Esta definição é mais lata que a dada na referência 6.

2-Carb-1.15. Polissacáridos (*bras.* polissacarídeos)

Polissacárido (*bras.* polissacarídeo) (glicano) é o nome dado a uma macromolécula constituída por um grande número de unidades de monossacárido (*bras.* monossacarídeo) (glicoses)* que estão unidas por ligações glicosídicas. O termo poli(glicose) não é um sinónimo de polissacárido (*bras.* polissacarídeo) (glicano) [20] porque este inclui macromoléculas compostas por unidades de glicose ligadas entre si por ligações não glicosídicas.

Em polissacáridos (*bras.* polissacarídeos) contendo uma proporção considerável de unidades de aminoaçúcares, o termo polissacárido (*bras.* polissacarídeo) é adequado, mas o termo glicosaminoglicano pode ser utilizado para dar uma maior ênfase ao tipo de composto.

Polissacáridos (*bras.* polissacarídeos) constituídos por um tipo único de monossacárido (*bras.* monossacarídeo), podem chamar-se homopolissacáridos (*bras.* homopolissacarídeos) (homoglicanos). Analogamente, se os compostos forem constituídos por dois ou mais tipos de unidades monoméricas diferentes, o termo (nome de classe) heteropolissacárido (*bras.* heteropolissacarídeo) também pode ser utilizado (vd. 2-Carb-39).

* Nota dos tradutores

O termo glicose (*glycose, Glykose*) não é sinónimo de glucose mas sim um termo utilizado genericamente para unidades de monossacárido (*bras.* monossacarídeo), enquanto elementos estruturais.

O termo glicano também tem sido usado para designar a parte de sacárido (*bras.* sacarídeo) de uma glicoproteína, mesmo que o comprimento da cadeia não seja muito grande. Tem também sido frequentemente usado o termo polissacárido (*bras.* polissacarídeo) para designar macromoléculas com unidades de glicose ou alditol, nas quais tanto existem ligações glicosídicas como ligações do tipo diéster fosfórico.

2-Carb-1.16. Convenções usadas nos exemplos

1.16.1. Os nomes dos exemplos são dados com a inicial maiúscula (por exemplo: L-*glicero-β-D-gluco*-Heptopiranoose) para tornar mais claro o seu uso em títulos e para mostrar qual é a letra que controla a ordenação em índices alfabéticos.

1.16.2. As seguintes abreviaturas são utilizadas normalmente para designar os grupos substituintes nas fórmulas estruturais: Ac (acetilo, *bras.* acetila), Bn ou PhCH₂ (benzilo, *bras.* benzila), Bz ou PhCO (benzoílo, *bras.* benzoíla), Et (etilo, *bras.* etila), Me (metilo, *bras.* metila), Me₃Si (não TMS) (trimetilsililo, *bras.* trimetilsilila), Bu^tMe₂Si (não TBDMS) (*terc*-butildimetilsililo, *bras.* *terc*-butildimetilsilila), Ph (fenilo, *bras.* fenila), Tf (triflilo = trifluorometanossulfonilo *bras.* trifluorometanossulfonila), Ts (tosilo = tolueno-*p*-sulfonilo, *bras.* tosila = tolueno-*p*-sulfonila), Tr (tritilo, *bras.* tritila).