HJ

中华人民共和国环境保护行业标准

HJ/T XXXX-200X

新化学物质分类、命名标准

The standard for the classification and nomenclature of new chemical substances

(征求意见稿)

20XX-XX-XX发布 20XX-XX-XX实施

国家环境保护总局 发布

目录

前言 3
1. 范围.....4
2. 规范性引用文件.....4
3. 术语和定义.....4
4. 新化学物质类名的一般性规定.....5
5. 有确定化学结构的新化学物质的类名规定.....6
6. 无确定化学结构的新化学物质的类名规定.....7
7. 酶物质类名的特别规定.....8
8. 实施要求.....8
附录 A（资料性附录）符合规范的新化学物质类名举例 9

前言

为贯彻《新化学物质环境管理办法》，规范新化学物质申报登记，同时保守新化学物质申报登记中的商业秘密与技术秘密，制定本标准。

本标准规定了新化学物质申报登记时新化学物质类名的编写事项。

本标准的技术内容主要采用国际通用的新化学物质申报的相关技术方法，并借鉴我国现有化学物质名录编制增补及新化学物质评审的经验。

本标准为指导性标准。

本标准由国家环境保护总局科技标准司提出。

本标准主要起草单位：国家环境保护总局化学品登记中心。

本标准国家环境保护总局20XX年XX月XX日批准。

本标准由国家环境保护总局20XX年XX月XX日起实施。

本标准由国家环境保护总局解释。

新化学物质分类、命名标准

1. 范围

本标准规定了新化学物质申报登记时新化学物质类名的编写事项。

本标准适用于新化学物质申报登记时新化学物质类名的编写。新化学物质申报登记时新化学物质类名的评审亦可参照本标准进行。

2. 规范性引用文件

本标准内容引用了下列文件中的条款。凡是不注日期的引用文件，其有效版本适用于本标准。

《新化学物质环境管理办法》（国家环境保护总局令　第17号）

3. 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

3.1. 新化学物质

New chemical substance

《新化学物质环境管理办法》所称的新化学物质，即2003年10月15日前尚未在中华人民共和国境内生产或者进口的化学物质。

3.2. 新化学物质类名

Generic name of new chemical substance

新化学物质申报登记时用以替代新化学物质化学名称出现在公开文献中的名称。新化学物质类名既能反映新化学物质的基本化学类别，又能保守新化学物质化学名称所提示的商业秘密或技术秘密。

3.3. 新化学物质化学名称

Chemical name of new chemical substance

一般新化学物质的英文化学名称指符合国际纯粹与应用化学联合会(International Union

of Pure and Applied Chemistry, IUPAC)或化学文摘社（Chemical Abstracts Service, CAS）推荐的命名法的名称；中文化学名称指符合中国化学会或全国科学技术名词审定委员会推荐的系统命名法的名称。

新生物化学物质的英文化学名称指符合国际生物化学与分子生物学联合会(International Union of Biochemistry and Molecular Biology, IUBMB)推荐的命名法的名称；中文化学名称指全国科学技术名词审定委员会推荐的系统命名法的名称。

3.4. 有确定化学结构的新化学物质

New chemical substance having a definite chemical structure

可以用确定的结构图表示其结构的新化学物质。其化学名称通常揭示了下列结构信息：

(1) 基本结构的结构类型(例如：碳链、环系或配位金属)；

(2) 基本结构或其他化学基团上的取代基团的类型、数量和位置；

(3) 离子的类型及数量；

(4) 立体化学关系。

3.5. 无确定化学结构的新化学物质

New chemical substance not having a definite chemical structure

无法用确定的结构图表示其结构的新化学物质，通常是化学组成未知或不确定的复杂的反应产物或生物物质。其化学名称通常揭示了下列信息：

(1) 化学物质的来源或前体；

(2) 化学物质的生产加工过程(和条件)。

4. 新化学物质类名的一般性规定

4.1 应以新化学物质化学名称为基础，不能违反新化学物质化学名称所反映的化学分类。

4.2 可隐匿、省略或用最贴近的一般性描述符替代化学名称中表示各种化学结构特征、物质来源、生产工艺过程等的具体描述符。

4.3 通常只能隐匿、省略或替代化学名称中的一项具体描述符。

4.4 若仅保密某一项结构描述符无法充分保密某一特定物质的具体信息，说明理由后可提出双重或多重保密类名。

4.5 不能以新化学物质或含新化学物质的化学制品的商品名、通用名、缩写名表示(若这种名称不符合4.1条的规定)；也不能以字母或数字等符号表示。

5. 有确定化学结构的新化学物质的类名规定

5.1. 基本结构的类型

编制类名时，可以用一般性描述符替代化学名称中表示基本结构的具体描述符。如：

烷基或烷烃(Alkyl or alkane)；

烯基或烯烃(Alkenyl or alkene)；

炔基或炔烃(Alkynyl or alkyne)；

单环基或单环(Carbomonocyclic or carbomonocycle)；

多环基或多环(Carbopolycyclic or carbopolycycle)；

杂单环基或杂单环(Heteromonocyclic or heteromonocycle)；

杂多环基或杂多环(Heteropolycyclic or heteropolycyle)；

碱金属(alkali metal)；

碱土金属(alkaline-earth metal)；

过渡金属(transition metal)；

卤代(halogen)；

等。

5.2. 化学基团的类型

编制类名时，可以用一般性描述符替代化学名称中表示化学基团类型的具体描述符。如：

卤代(halosubstituted)；

取代(substituted)；

等。

5.3. 化学基团的数量和位置

对于数量只有一个的化学基团，编制类名时，通常省略化学名称中表示其位置的描述符。

对于数量有多个的某化学基团，编制类名时，可以用一般性描述符替代化学名称中表示其数量和位置的具体描述符。如：

多(multi)；

聚(poly)；

等。

5.4. 离子的类型和数量

编制类名时，可以用一般性描述符替代化学名称中表示其离子类型和数量的具体描述符。如：

阴离子(anion ion)；

阳离子(cation ion)；

两性离子(amphoteric ion)；

多(multi)；

等。

5.5. 立体化学关系

编制类名时，通常省略表示立体化学关系的描述符。

6. 无确定化学结构的新化学物质的类名规定

6.1. 新化学物质的来源或前体

对于生物来源的新化学物质，化学名称中表示生物来源的描述符可能包括生物的组织器官、品系或亚种、种、属、科，其中，越是前面的描述符反映的信息越具体。编制类名时，可以通过隐匿省略化学名称中表示生物来源的最具体的那部分描述符来完成。

对于化学或矿物质来源的新化学物质，编制类名时，只要对组成其化学或矿物质来源的某个组分参照上述第5项(有确定化学结构的新化学物质的类名规定)进行即可。

6.2. 生产新化学物质的工艺过程(和条件)

6.2.1 编制类名时，若化学名称中含有生产条件，则隐匿省略生产条件；

6.2.2 编制类名时，若化学名称中不含有生产条件，则化学名称中代表各种合成或提取工艺过程的具体描述符可以用一般性描述符表示。如：

聚合物(polymer)；

化合物(compound)；

(化学)反应产物(reaction product)；

(酶催化)反应产物(enzyme catalysed reaction product)；

(化学)衍生物(chemical derivative)；

(物理)衍生物(physical derivative)；

等。

7. 酶物质类名的特别规定

7.1 酶的类名可通过隐匿由国际生物化学与分子生物学联合会指定的酶学委员会数字代码的第4级数字及其代表的具体描述符来实现。

7.2 若酶学委员会数字代码第4级只有1位数，则可以隐匿第3级和第4级数字，以反映前2级数字代码的名称为类名。

8. 实施要求

本标准由县级以上人民政府环境保护行政主管部门负责监督实施。

附录 A (资料性附录)

符合规范的新化学物质类名举例

例1

$CF_3CF_2CF_2CF_2CF_2CH_2N(CH_2CH_2OH)_2$

化学名称

2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-十一氟代-氮,氮-二(2-羟乙基)己胺

符合规范的类名

③ 保密氟原子

2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-十一卤代-氮,氮-二(2-羟乙基)己胺，或，2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-十一取代-氮,氮-二(2-羟乙基)己胺

③ 保密氟原子数目

多氟代-氮,氮-二(2-羟乙基)己胺

③ 保密羟基

2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-十一氟代-氮,氮-二(2-取代乙基)己胺

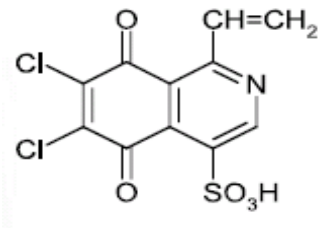
③ 保密己烷基本结构及定位符

十一氟代-氮,氮-二(2-羟乙基)烷基胺

③ 保密胺基及氮原子定位符

2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-十一氟代二(2-羟乙基)己烷衍生物

例2



化学名称

1-乙烯基-5,8-二氢-5,8-二氧代-6,7-二氯-4-异喹啉磺酸

符合规范的类名

③　保密乙烯基

1-烯基-5,8-二氢-5,8-二氧代-6,7-二氯-4-异喹啉磺酸

③　保密氧代基

1-乙烯基-5,8-二氢-5,8-二取代-6,7-二氯-4-异喹啉磺酸

③　保密氯原子

1-乙烯基-5,8-二氢-5,8-二氧代-6,7-二卤代-4-异喹啉磺酸

③　保密磺酸基

1-乙烯基-5,8-二氢-5,8-二氧代-6,7-二氯-4-取代异喹啉

③　保密异喹啉环及定位符

二氯乙基二氢二氧代杂多环基磺酸，或，二氯乙基二氢二氧磺酸基杂多环

例3

化学名称

亚麻油脂肪酸与乙二醇富马酸和马来酸酐的聚合物

符合规范的类名

③　保密亚麻油

脂肪酸与乙二醇富马酸和马来酸酐的聚合物

③　保密富马酸

亚麻油脂肪酸与乙二醇烯二酸和马来酸酐的聚合物

例4

化学名称

戊烯的醛化产物

符合规范的类名

③　保密戊烯

烯烃(C=1-10)的醛化产物

③　保密醛化

戊烯的化学衍生物

例5

化学名称

窄叶蜡菊乙醇提取物

符合规范的类名

③　保密窄叶蜡菊物种

蜡菊乙醇提取物

③　保密乙醇

窄叶蜡菊提取物

例6

酶学委员会4级代码名称

胆固醇酮 5β-还原酶　　酶学委员会数字代码1.3.1.22

符合规范的类名

NADP+ 氧化还原酶　　酶学委员会数字代码1.3.1

例7

酶学委员会4级代码名称

6-羟基烟酸还原酶　　酶学委员会数字代码1.3.7.1

符合规范的类名

受体氧化还原酶　　酶学委员会数字代码1.3