

新化学物质分类、命名标准

(征求意见稿)

编制说明

目录

一、编制本标准的必要性及编制任务的下达.....	3
二、编制过程.....	4
三、标准的名称.....	4
四、标准的前言.....	5
五、标准的正文.....	5
六、标准的附录.....	9
七、标准应用中需注意之处.....	9

一、编制本标准的必要性及编制任务的下达

1、贯彻《新化学物质环境管理办法》，规范新化学物质申报登记

2003年国家环境保护总局颁布了《新化学物质环境管理办法》（总局17号令，2003年10月15日实施），规定生产或者进口新化学物质的，必须在生产前或者进口前进行新化学物质申报，申请领取新化学物质环境管理登记证。

新化学物质申报表中专门设有新化学物质类名的栏目，允许申报单位对申报的新化学物质给出一个类名，以代替化学名称出现在公开资料中。

《办法》实施四年多来，申报人给出的新化学物质类名各式各样，很不规范，存在的主要问题有：（1）将申报物质的功能和作用作为类名，如：“润滑油”、“添加剂”等；（2）以商品名表示，如：“着色剂4013M”、“吡啶NKS-4”等；（3）以范畴特别大的化学名词概念表示，如：“不饱和酮”、“腈”、“偶氮染料”、“有机硅烷”等。因此，编制本标准可以规范新化学物质申报登记。

2、确保政府公布的信息质量

新化学物质申报登记若干时间后，政府将公布申报登记的情况，新化学物质也将列入《已在中华人民共和国生产或者进口的化学物质名单》中。新化学物质类名将代替化学名称出现在这些政府文件资料中。编制本标准，规范新化学物质类名，可以确保政府公布的信息质量。

3、保守新化学物质的商业秘密和技术秘密

新化学物质是因商业目的第一次在国内生产或进口进入中国的化学物质，含有储多的商业秘密和技术秘密。《办法》第七条规定：“从事新化学物质环境管理的机构及其工作人员，应当为新化学物质申报人（以下简称申报人）提交的材料保守商业秘密和技术秘密。”

新化学物质的商业秘密和技术秘密，其中一部分就体现在新化学物质的化学名称中。申报人提出新化学物质类名，就是为了保守新化学物质的化学名称中含有的商业秘密和技术秘密。编制本标准，就是从化学物质类名的角度来规范如何保守新化学物质的商业秘密和技术秘密。

鉴于上述诸多原因，以及随着新化学物质申报制度的实施，申报的新化学物

质不断增加，申报人提交的各种不规范的新化学物质类名也越来越多，问题逐渐迭现，2006年10月国家环境保护总局科技标准司下达了“新化学物质分类、命名标准”计划任务书（项目编号：1676），由国家环境保护总局化学品登记中心承担本标准的编制工作。

二、编制过程

2007年3月20日，国家环保总局科技标准司主持了本标准的开题论证会，确定了本标准编制的思路、框架内容、技术路线与方法。

2007年11月，编写组经反复讨论，征求各方专家、学者的意见，几经修改，完成了本标准的征求意见稿。

三、标准的名称

2006年10月国家环境保护总局科技标准司下达的计划任务书（项目编号：1676）中，本标准的名称是“新化学物质分类、命名标准”。

2007年3月20日，国家环保总局科技标准司组织的本标准开题论证会上，与会专家建议将本标准的名称改为“新化学物质登记分类与命名标准”标准，强调本标准是为新化学物质申报登记服务。

2007年10月26日，本标准编制承担单位——国家环保总局化学品登记中心组织的专家研讨会上，专家们再次对本标准的名称进行了讨论，认为无论是“新化学物质分类、命名标准”，还是“新化学物质登记分类与命名标准”，与标准的真正目的不够贴切，建议标准名称中直接点明新化学物质类名，取名为“新化学物质登记类名编写标准”。

本标准征求意见稿中还是引用计划任务书中的标准名称。在此特别说明，意在广泛征求大家对本标准名称的意见和建议。

四、标准的前言

本标准由前言、正文和附录组成。

前言中对例行规定的内容进行了说明，特别指明本标准的编写目的是贯彻《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。从某种角度来讲，新化学物质类名即新化学物质保密名。本标准在前言中对保密之目的加以总括性说明，在下面的正文中不再重复强调。

前言中同时说明本标准的主要内容是规定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发达国家关于新化学物质申报的相关技术方法、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。

前言中将本标准法律定位为行业指导性标准。

五、标准的正文

正文说明了本标准的应用范围、规范性引用文献；对术语定义作了描述；提出了新化学物质类名的一般性规定；对两大类物质——有确定结构的化学物质和无确定结构的化学物质，分别提出了类名编写规定；此外，由于酶的化学名称的特殊性，对酶类名提出了特别规定。

1、标准的应用范围

正文中说明“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。”体现了本标准除了规范申报人的申报行为外，同时也为新化学物质评审提供了可靠的技术参考。

2、规范性引用文献

本标准主要的编写目的是贯彻《新化学物质环境管理办法》，规范新化学物质申报登记。因此，标准将《新化学物质环境管理办法》作为规范性引用文献。标准在对“新化学物质化学名称”这一术语作定义时，引用了国际纯粹与应用化学联合会、中国化学会等有学术团体的推荐方法，但未将他们编制的文献作为规

范性引用文献。

3、术语和定义

本标准对“新化学物质”、“新化学物质类名”、“新化学物质化学名称”、“有确定化学结构的新化学物质”、“无确定化学结构的新化学物质”五个术语做出了定义描述。

(1) “新化学物质”

标准中关于“新化学物质”的定义，引用了《新化学物质环境管理办法》。

(2) “新化学物质类名”

“新化学物质类名”的定义是“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。”这里不仅指出了新化学物质类名在新化学物质申报登记中的意义和作用、新化学物质类名与新化学物质化学名称的关系，也反映了新化学物质类名的基本情况和应达到的总体要求。

(3) “新化学物质化学名称”

基于以下原因，本标准将“新化学物质化学名称”作为术语进行定义：(a) 新化学物质化学名称是区分判断两个物质是否是同一物质的重要根据；(b) 新化学物质类名是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，同时，用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是编制新化学物质类名的重要方法，因此新化学物质化学名称是新化学物质类名的重要基础；(c) 无论新化学物质类名，还是新化学物质化学名称，两者都是管理上的概念，不是纯学术概念，与一般对化学名称的理解有一定的区别。

本标准对“新化学物质化学名称”的定义如下：

“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。

对于无确定化学结构的新化学物质，申报时关于该化学物质来源或前体、生产加工过程(和条件)等方面的定义性描述视为该物质化学名称的一部分。”

此处，新化学物质化学名称是个管理上的概念。对于无确定化学结构的新化学物质，即使其IUPAC名称或CAS名称相同，若申报时关于其化学物质来源或前体、生产加工过程(和条件)等方面的定义性描述不同，则管理上作为不同的化学物质对待。因此，将申报时关于该化学物质来源或前体、生产加工过程(和条件)等方面的定义性描述视为其英文和中文化学名称的一部分。

(4) “有确定化学结构的新化学物质”和“有确定化学结构的新化学物质”

从化学结构的角度，新化学物质可以分为两大类：有确定化学结构的新化学物质和无确定化学结构的新化学物质。IUPAC或CAS对两类物质的命名方法也不尽相同。因此，这两类物质的类名编制方法也不同。为了在下文中对这两类物质的类名编制分别进行规定，标准中对其分别进行了定义。

“有确定化学结构的新化学物质”的定义是“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：(a)基本结构的结构类型(例如：碳链、环系或配位金属)；(b)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；(c)离子的类型及数量；(d)立体化学关系。定义中提到化学名称中揭示的信息，主要为了配合下文中的类名规定。

“无确定化学结构的新化学物质”的定义是“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：(a)化学物质的来源或前体；(b)化学物质的生产加工过程(和条件)。”定义中提到化学名称中揭示的信息，也是为了配合下文中的类名规定。

4、新化学物质类名的一般性规定

一般性规定体现了类名在新化学物质申报登记中的基本情况和总体要求——既能反映新化学物质的基本信息和化学分类，又能保守新化学物质名称所含的商业秘密和技术秘密。这是一对矛盾的平衡，不能为了反映化学分类，将化学名称含有的所有主要信息都暴露出来，也不能为了保守商业秘密和技术秘密，隐匿所有主要信息。因此，本标准提出新化学物质类名应符合以下一般性规定：

(1) 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；

(2) 可以隐匿、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；

(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。

若严格执行上述规则(仅保密某一项具体描述符)无法充分保密某一特定物质的具体信息，应说明理由，才能提出双重或多重保密类名；

(4) 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(若这种名称不符合上述(1)项规定)；也不能以字母或数字等符号表示。

5、有/无确定化学结构的新化学物质的类名规定

本标准对有确定化学结构的新化学物质和无确定化学结构的新化学物质的类名编制分别提出了规定，对其各自化学名称中的不同部分提出不同的隐匿、省略或替代方法，以达到对整个化学名称进行替代的目的。

用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是编制新化学物质类名的重要方法。一般性描述符和具体描述符是两个相对的概念，例如，“烷烃(C1-C10)”相对“辛烷”是一般性描述符，但相对“烷烃”是具体描述符；“碱金属”相对“钠”是一般性描述符，但相对“金属”是具体描述符；“萃取”相对“用乙醇萃取”是一般性描述符，但相对“提取”是具体描述符。为了确保类名能够反映新化学物质的化学分类，要求选用最贴近的一般性描述符替代具体描述符。

由于化学物质的多样和复杂，有结构非常简单的物质，如氯化钠，也有结构非常复杂的物质，如6-(反式-4-丙基环己基)-2-(3,4,5-三氟代苯基)-1-氟代萘，另有一些结构不知或不确定的物质，如亚麻子油与2-乙基-2-(羟甲基)-1,3-丙二醇和1,3-异苯并呋喃二酮聚合物，不同的物质，其化学名称中的各种具体描述符适用不同的一般性描述符。将适用各种具体描述的所有一般性描述符一一列出不可能，也无必要。因此，本标准用枚举法在不同章节列出了适用本章节情况的典型的一般性描述符。

6、酶物质类名的特别规定

尽管从化学结构的角度，酶也可分为有/无确定化学结构的酶两大类。但国际上酶的命名通常使用酶学委员会四级代码名称，不同于IUPAC或CAS对一般化学物质的命名方法。因此，新酶物质类名的编制也应不同于一般新化学物质的类名。本标准对酶物质的类名做出了特别规定。

六、标准的附录

为了更好地解释和说明如何编制符合规范的新化学物质类名,本标准的附录部分是一些类名编制的例子,例1和例2举例说明了有确定结构的化学物质的类名编写,例3、例4和例5举例说明了无确定结构的化学物质的类名编写,例6和例7举例说明了酶类名编写。

七、标准应用中需注意之处

本标准规定了新化学物质类名的编制方法。申报人提交的新化学物质类名应符合本标准的规定。同一个新化学物质,符合本标准规定的类名可能有多个,选哪个作为申报时的新化学物质类名取决于申报人。新化学物质评审委员会对申报人提交的新化学物质类名是否合适进行评审。国家环境保护总局公布已获登记的新化学物质类名。