

新化学物质申报登记

标识信息技术要求（试行）

按照化学结构和来源，新化学物质分为无机物、有机物、有机金属或金属有机化合物、聚合物、混合物、反应产物、来源于生物的化学物质（包括酶、提取物等）或材料、染料和颜料、其他等九个类别。

新化学物质申报登记的标识信息包括物质的中文名称、英文名称、化学文摘号、分子式和结构式，当申报人要求对上述信息保密时，还应给出物质的中、英文类名。标识信息登记的具体要求如下：

一、化学文摘号

化学文摘号系指美国化学文摘社登记号（Chemical Abstracts Service Registry Number），简称 CAS 号。

（一）具有 CAS 号的物质

具有 CAS 号的物质应提交准确、有效的 CAS 号。申报物质的结构信息应与 CAS 号对应的物质结构信息完全一致，不应是 CAS 号对应物质的一部分，也不允许 CAS 号对应物质是申报物质的一部分。CAS 号对应的有关标识信息以权威数据库为准（如 SciFinder 数据库、CA 光盘版数据库、纸质版 CA 等 CAS 所属的产品或权威的相关数据库）。当已知申报物质 CAS 号存在被代替、删除等情况时，应予以提供。

(二) 无 CAS 号的物质

经查证确认不具有 CAS 号的物质，不需要提供 CAS 号。对于正在申请 CAS 号的物质，申报单位应在 CAS 号申请完成后及时提交登记中心该物质的 CAS 号信息，包括 CAS 号、CA 索引名称 (CA Index Name)、全部其他名称 (Other Name)、分子式和结构式。

二、名称

申报物质的名称包括中/英文化学名称、中/英文类名和其他名称。化学名称和类名的中英文应相互对应。

(一) 中文名称

1、具有唯一、确定分子结构的物质

具有唯一、确定分子结构的物质应按照中国化学会《无机化学命名原则》(1980 版)、《有机化学命名原则》(1980 版)、全国科学技术名词审定委员会《高分子化学命名原则》(2005 版)、国家标准《化学品命名通则》(GBT23955),或参照现行的 IUPAC 命名规范文件，对各类化学物质进行命名。

2、无唯一、确定分子结构的物质

无唯一、确定分子结构的物质分为以下两种情况：

(1) 有 CAS 号的物质

可参考 CA 索引名称命名中文名称，但必须符合中文命名规范基本要求。

(2) 无 CAS 号的物质

聚合物：参照《高分子化学命名原则》。已知重复结构单元的，采用结构基础命名法命名；未知重复结构单元的，采用来源基础命名法命名。来源基础命名的表述形式一般为：

单体 1 与单体 2 (、 单体 3、和最后一个单体) 的聚合物。

必要时还需在“聚合物”前插入描述结构、形态或者工艺等的修饰，如无规、交替、嵌段、接枝等。若聚合物具有非来自于聚合物单体的封端基团，在“聚合物”前还需插入“ α -封端基 1- ω -封端基 2 的”的表述。

多步聚合的聚合物应分层次描述名称，不同层次应使用括号分开。

混合物：按照《中华人民共和国国家标准 化学品命名通则》(GB/T 23955) 命名。

反应产物：按照来源基础命名，表述形式为：

反应物 1 与反应物 2 (、 反应物 3、和最后一个反应物) 的反应产物。

多步反应的反应产物应分层次描述名称，不同层次应使用括号分开。

来源于生物的化学物质或材料：按照《中华人民共和国国家标准 化学品命名通则》(GB/T 23955) 命名。

染料和颜料：采用 C.I. (颜料索引) 名称 (有明确结构的染料和颜料除外)。

3、中文命名的一些注意事项

- (1) 学科中约定的名称可作为物质名称；
- (2) 中文名称中不允许出现空格；连字符“-”使用要符合化学物质命名的基本原则，不能随意增减；
- (3) 名称中所有的数字、英文字母、括号、连字符、撇等符号均应采取半角格式；
- (4) 有些特殊字符应使用斜体，如前述聚合物中的“ α ”、“ ω ”等；
- (5) 对于复杂的描述性名称，应采用括号表示不同层次，以便于识别与阅读。

(二) 英文名称

应按照现行的 IUPAC 命名规范命名，或者使用 CA 索引名称。其他英文名称、俗称、惯用名和行业内名称等，可以保留作为“其他名称”。

(三) 类名

新化学物质常规申报登记时要求标识信息保密的，应给出中文类名和英文类名，此类名可用于新化学物质审批公示、公告、登记证，以及被公布列入《中国现有化学物质名录》时使用。中文类名应参照《新化学物质申报类名编制导则》(HJ/T 420-2008) 编制，英文类名根据中文类名翻译编制。

三、分子式

应正确表述分子中各元素及其排列顺序和下标。

(一) 无机物

按照单质、化合物(酸、碱、盐等)、配合物等结构组成的基本规范来表述。

(二) 有机物

按照合并分子中同类元素的方式表述,不按照官能团方式表述。表述元素顺序按照C、H以及其他元素(按字母顺序)。

(三) 有机金属化合物、有机盐

参照无机物分子式表述。对于结构或局部结构不确定的,采用“有机物分子式·x 金属元素符号”方式表述,其中“有机物分子式”为完整的分子式;“·”为中圆点(不能是小数点);“x”为构成系数,可以是整数或分数。

(四) 聚合物

按照重复单元、结构单元或单体方式表述,形式如下:

1、**重复单元方式**:(重复单元分子式)_x,其中“x”为下标,括号需使用半角括号;

2、**结构单元方式**:(结构单元分子式)_x,其中结构单元内各组分单元间用中圆点“·”连接;

3、**单体方式**:(各单体完整分子式)_x,其中各单体分子式间用中圆点“·”连接。

若聚合物具有非来自于聚合物单体的封端基团,应在聚合物分子式前后加上封端基团的分子式。

(五) 混合物

按照组成成分方式表述，各组成成分的完整分子式间用“+”连接。

(六) 反应产物

按照反应物方式表述，各反应物的完整分子式间用“·”连接。

(七) 来源于生物的化学物质或材料

一般属于没有唯一确定分子结构的物质，组成繁杂、结构复杂，可不提供分子式。若有已知的确定成分，应给出已知成分分子式，各已知成分分子式间用“+”连接，后接“+W99”表述其余未知成分。

(八) 染料和颜料

一般属于没有唯一确定分子结构的物质，结构较为复杂，可不提供分子式。但对于已知分子结构的物质，应按上述规定给出分子式。

四、结构式

(一) 有唯一、确定分子结构的物质

有唯一、确定分子结构的物质应使用 ChemDraw 软件绘制(下同)准确、完整的结构式。然后在 ChemDraw 界面复制结构式并直接粘贴到申请表 Word 文件的相应栏目中，不要另存为图片文件后再插入 Word 文件。

(二) 主体结构唯一确定但局部结构不确定的物质

已经明确的主体结构应绘制其结构式，不确定键接位置的局部结构或局部结构可变的部位，应采取不定位置结构的表示方式

或注释、文字说明的方式表述。例如，苯环上取代基位置不确定时，可以从苯环中心引出垂直于苯环某一边的键的方式来表示；局部结构没有确定的分子结构时，可以用中文或名称代替。存在多种不同结构形式时，应给出主要成分的物质结构式，并注明其为典型的结构形式，作为参考结构式。

具有明确重复单元或结构单元的聚合物，应绘制出其结构式，并在结构式左右两边加上括号，在右括号外加注“x”。若有非来自于聚合物单体的封端基团，应将封端基团的结构式绘制在括号两侧，并用键接线通过括号连接。

(三) 结构不确定的物质

聚合物（具有明确的重复单元或结构单元的除外）、反应产物、混合物等无唯一、确定结构的物质体系，应按照各单体、反应体、组分在物质名称中出现的次序，依次绘制各单体、反应体、组分的结构式。当其中某单体、反应体、组分没有确定结构式时，可以用中文或英文名称代替。对于聚合物，各单体间用“·”连接，并在结构式左右两边加上括号，在右括号外加注“x”；对于反应产物，各反应体间用“·”连接；对于混合物，各组分间用“+”连接。多步反应的物质体系，应分层次用括号括起来。

(四) 对结构式的其他要求

1、不接受 Newman 投影式作为结构式。

2、含有双键顺反异构、手性分子中心等物质，其结构式中应包含相应的立体结构信息，标识字母用斜体。表示立体结构

时应正确使用楔形线、虚线、实线等。

3、来源于生物的化学物质或材料属于结构复杂的天然有机物或材料，应尽可能给出已知的确定的结构式片段。有已知组分的，按混合物要求给出结构式，并注明有未知组分及其所占大体比例；没有已知组分但知道含有某些典型结构官能团的，应给出典型官能团结构，注明为典型结构片段。

4、有确定结构的染料和颜料，应给出结构式；没有确定结构式的，须有 C.I.标识信息。