



中华人民共和国国家标准

GB/T 23955—2009

化学品命名通则

General principle for naming of chemicals

2009-06-02 发布

2010-02-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局
中国国家标准化管理委员会 发布

前 言

本标准与欧盟 REACH(化学品的注册、评估、授权和限制)法规技术指南文件 RIP 3.10:2007《物质的鉴别与命名指南》(英文版)的一致性程度为非等效。

本标准由中国石油和化学工业协会提出。

本标准由全国化学标准化技术委员会(SAC/TC 63)归口。

本标准负责起草单位:国家质检总局进出口化学品安全研究中心、中国检验检疫科学研究院。

本标准主要起草人:孙鑫、陈会明、于文莲、王立峰、李晞、张静、李蕾。

化 学 品 命 名 通 则

1 范围

本标准规定了单成分物质、多成分物质和 UVCB 物质的命名通则。

本标准适用于 REACH 法规框架下的单成分物质、多成分物质和 UVCB 物质的命名。

2 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

2.1

添加剂 additive

为了使物质稳定而有意加入的物质。

注：在其他的领域，添加剂也可能有其他的作用，比如，pH-调节剂或着色剂。

2.2

组分 component

为组成配制品而有意加入的物质。

2.3

成分 constituent

存在于物质中具有独特化学特性的任何单一个体。

2.4

EC 目录 EC Inventory

欧盟前化学品法规框架的三个物质目录，EINECS(欧洲现有商业化学品目录)、ELINCS(欧洲已通报化学品目录)和 NLP(不再定义为聚合物目录)的合称。

注：该 EC 目录作为物质标识的 EC 编号的来源。

2.5

杂质 impurity

在生产时不希望出现在物质中的成分。可能来自原材料或者是生产过程中副反应或不完全反应的结果。尽管不是有意加入的，但存在于最终产物中。

2.6

主要成分 main constituent

不是添加剂也不是杂质，在物质中作为该物质的有效部分的成分。

2.7

单成分物质 mono-constituent substance

通常按物质的成分而定，其主要成分质量分数至少为 80% 的物质。

2.8

多成分物质 multi-constituent substance

通常按物质的成分而定，不止一种主要成分质量分数大于等于 10% 且小于 80% 的物质。

2.9

配制品 preparation

两种或两种以上物质组成的混合物或溶液。

2.10

物质 substance

自然状态下存在的或通过生产过程获得的化学元素及其化合物,包括保持其稳定性所需的添加剂和加工过程中产生的杂质,但不包括不会影响物质稳定性或不会改变其成分的可分离的溶剂。

3 概要

3.1 物质主要分为两类:

- a) 有准确定义的物质:可完整的用定性定量的组分定义的物质;
- b) 未知或可变组分物质、复杂反应产物或生物材料物质(以下简称 UVCB 物质)。

3.2 有准确定义的物质其组分的变化用主要成分的浓度上下限来表示。对于 UVCB 物质其变化很大或者不可预知。

3.3 “有准确定义的物质”、一种主要成分的物质和不止一种主要成分的物质命名法不同。“UVCB”中不同类型的物质,其命名法也不同。

4 有准确定义组成的物质

有准确定义化学组成的物质根据其主要成分命名。

物质中的主要成分:非添加剂或杂质的一种成分,作为最主要的物质组成部分,因此用作物质命名。

单成分物质或多成分物质中不是主要成分的成分(除添加剂外)可被视为杂质。尽管在有些地方普遍使用“痕量物质”这个词,但在本标准中仅使用“杂质”这个词。

单成分和多成分物质依下述规则区分:

- a) 单成分物质是指一种成分质量分数至少为 80%,杂质质量分数不到 20%的物质。单成分物质根据其主成分命名;
- b) 多成分物质是指由多个质量分数介于 10%到 80%之间的主要成分组成的物质。多成分物质被命名为两个或多个主要成分的反应混合物。

在本标准的定义中,配制品是物质的有意混合,因此不是多成分物质。

4.1 单成分物质的命名

单成分物质用主要成分命名。原则上其英文名称应按照 IUPAC(国际纯化学与应用化学联合会)命名法命名。此外也可用其他的国际接受的命名法命名。

4.2 多成分物质的命名

多成分物质用物质的主要成分的反应混合物命名,不是用生产物质所需的原料。一般格式是:“[主成分名称]的混合物”。成分名称按其含量百分比由高到低的顺序排列。只在命名中出现含量高于 10% 的组分。原则上,其英文名称应按照 IUPAC 命名法命名。此外也可用其他的国际接受的命名法命名。

对于无机矿物材料各组分应采用矿物学命名。例如,磷灰石是一种多成分物质,由磷酸盐矿石组成,一般是指羟磷灰石,氟磷灰石和氯磷灰石,分别由在晶格中高浓度的 OH^- 、 F^- 或 Cl^- 离子命名。这三种共有部分混合物的化学式为 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$ 。另一个例子是霰石,它是一种特殊晶体结构的碳酸钙。

5 UVCB 物质

5.1 UVCB 物质的通则

未知或可变组分物质、复杂反应产物或生物材料物质,也称 UVCB 物质,不能充分用其化学组分确定,因为:

- a) 组分数量相对很大;

- b) 相当一部分组成未知;
- c) 组成的可变性相对很大或难以预知。

5.1.1 UVCB 物质的命名

通常 UVCB 物质的名称是用来源和加工程序合起来的格式表示:前面是来源,后面是加工程序。

- a) 生物来源的物质用物种名称表示;
- b) 非生物来源的物质用原料表示;
- c) 如果涉及新分子的合成,或是一种精炼步骤,如萃取,分馏,浓缩,或是剩余产物,加工程序用化学反应的类型表示。

在本标准中,一般反应产物的名称格式是“[原料名称]的反应产物”。原则上,其英文名称应按照 IUPAC 命名法命名。此外也可用其他的国际接受的命名法命名。建议在特定反应类型的命名中用一般的描述代替“反应”这个词,例如酯化或成盐等。

5.1.1.1 来源

来源分为两组:

a) 生物类来源

生物来源的物质要用属、种和科来定义。如瑞士石松,属是松,种是瑞士石松,科是松科,如果有关的话还有株或基因类型。在有可能的情况下还应说明物质提取的器官组织或部分,如骨髓、胰腺、茎、种子或根;

b) 化学品或矿物来源

化学反应的产物的原料应该用 IUPAC 的英文名称描述。矿物原料应该用通用术语描述,如磷矿、铝矾土、瓷土、金属煤气、煤、泥炭。

5.1.1.2 加工程序

5.1.1.2.1 如果涉及新分子的合成加工程序用化学反应类型或是提炼的步骤类型定义,如提取、分离、浓缩或是提炼的剩余产物。

5.1.1.2.2 对于某些物质如衍生化学物质,加工程序应用提炼和合成一起来描述:

a) 合成

在原料中发生特定的化学或生物学反应产生某种物质。例如格利雅反应、磺化反应、蛋白酶或脂肪酶的酶分解反应等。许多衍生反应也属于这种类型;

对于合成的新物质,无法得到其化学成分,原料和化学反应的种类是其主要标识。化学反应的种类预示了物质中会存在的分子。最终的化学反应有:水解、酯化、烷基化、氯化等。

b) 提炼

提炼可用于很多自然来源或矿物来源的物质,提炼过程中其化学成分不变,只是它的某成分浓度发生变化,如冷加工植物组织,然后用酒精萃取。

5.2 特殊类型的 UVCB 物质

特殊类型的 UVCB 物质有碳链长度不定的物质(5.2.1)、从油或油类来源中提取的物质(5.2.2)和酶(5.2.3)。

5.2.1 碳链长度不定的物质的命名

5.2.1.1 这类 UVCB 物质包括不定碳链长度的长链烷基物质,如烷烃和烯烃。这些物质从天然脂肪、油类中提取或通过合成得到。天然脂肪来源于植物或动物。通常从植物中得到的长碳链物质的碳链长度是偶数,而从动物中得到的长碳链物质的碳链长度还会有奇数。合成的长碳链物质的碳链长度奇数和偶数都有。

5.2.1.2 这类物质的成分有一个共同结构特征:一个或多个长链烷基带有一个官能团。不同一个或多个的烷基的特征其成分也会彼此不同,不同的烷基特征包括:

- a) 碳链长度(碳原子数目);
- b) 饱和度;

- c) 结构(直链型或支链型);
- d) 官能团的位置。

5.2.1.3 各成分的化学名称可用下述三个指标完整系统地命名:

- a) 烷基指标,描述烷基的碳链中的碳原子数目;

烷基指标如下:

- 1) 通常,烷基指标 C_{x-y} 指饱和的烷基,直链烷基包括从 x 到 y 的所有链长,如 C_{8-12} 表示 C_8 、 C_9 、 C_{10} 、 C_{11} 和 C_{12} ;
- 2) 如果烷基指标仅指偶数或奇数个碳原子的烷基链,应指出,如 $C_{8-12}(\text{偶数})$;
- 3) 如果烷基指标仅指支链的烷基,应指出,如 $C_{8-12}(\text{支链})$ 或 $C_{8-12}(\text{直链和支链})$;
- 4) 如果烷基指标仅指不饱和的烷基,应指出,如 $C_{12-22}(C_{18}\text{不饱和})$;
- 5) 短链烷基不涵盖长链的,反之亦然,如 C_{10-14} 与 C_{8-18} 不一致;
- 6) 烷基指标还可指出烷基链的来源,如可可或油脂。然而碳链长度的分布应和来源一致。

- b) 官能团指标,确定物质中的官能团,如胺基、铵、羧酸;

- c) 盐指标,盐的正/负离子,如钠离子(Na^+)、碳酸根离子(CO_3^{2-})、氯离子(Cl^-)。

5.2.1.4 上述系统用来描述碳链长度不同的物质。这个系统不适用于有准确定义的物质,有准确定义的物质应用明确的化学结构来定义。

5.2.1.5 烷基指标、官能团指标和盐指标信息是 UVCB 类型物质命名的基础。此外来源和加工程序信息可更好的用于确定物质。

5.2.2 取自油或油类来源的物质的命名

5.2.2.1 取自油(石油物质)或油类来源(如煤)的物质是组分复杂、可变或部分组分不明确的物质。下面用石油物质作为例子解释如何鉴别这种类型的 UVCB 物质。同样的方法也适用于其他取自油类来源的物质,如煤。

5.2.2.2 石油加工工业用的原料可能是原油,或经过一道或多道工序精馏而得的油。最终产物的组分取决于生产使用的原油(原油的组分取决于原产地)及后续的精炼程序。因此自然地,加工程序对石油物质的组分有单独的影响。

5.2.2.3 石油物质的名称建议按照一项已建立的命名法系统命名。名称的组成一般包括精炼程序、流出原料及主要组分或特征。如果物质中的 4 环到 6 环的芳烃质量分数超过 5%,这个信息要出现在描述中。对于有 EINECS 编号的物质,应使用 EC 目录中的名称。

5.2.3 酶的命名

5.2.3.1 酶通常是通过微生物发酵生产的,有时也来自植物或动物体。液相酶的浓度取决于发酵或提取及后续提纯、除水的程序、活性酶蛋白质和其他发酵后剩余的成分,即蛋白质、缩氨酸、氨基酸、糖类、脂类和无机盐。

5.2.3.2 酶物质一般含质量分数为 10%~80% 的酶蛋白质。其他成分含量各不相同,取决于所用的生物体产品、发酵中间体、发酵程序的操作参数、还有所用的下游提纯,表 1 中列出了典型的组分。

表 1 酶物质典型的组分

典型组分	质量分数
活性酶蛋白质	10%~80%
其他蛋白质+缩氨酸和氨基酸	5%~55%
糖类	3%~40%
脂类	0%~5%
无机盐	1%~45%
总量	100%

5.2.3.3 由于酶的可变和部分未知组分,它应被视为一种“UVCB 物质”。酶蛋白质应被视为 UVCB

物质的一种成分。高纯酶可被认作有准确定义组分(单成分或多成分)的物质,应按有准确定义物质命名。

5.2.3.4 酶的名称按照 IUBMB(国际生物化学和分子生物学联合会)命名法规定命名。

5.2.3.5 IUBMB 分类系统对每种类型的酶和催化反应性质提供了唯一的由 4 个阿拉伯数字组成的编号(如 α -amylase 是 3.2.1.1)。每组编号包含不同的氨基酸次序和来源,但是酶的功能都是一样的。

物质的鉴别应使用 IUBMB 命名法中的名称和编号。IUBMB 命名法将酶分为 6 大类:

- a) 氧化还原酶类;
 - b) 转移酶类;
 - c) 水解酶类;
 - d) 裂合酶类;
 - e) 异构酶类;
 - f) 连接酶类。
-