

대체 화학물질명칭(Lexicon guide 적용) 및 함유량 작성 기준 안내서

2023.12.21

안내서 제·개정 이력

차수	제·개정일	주요 개정내용
1.0	2023.12.21	-

이 안내서는 화학물질을 제조·수입하는 자 또는 대리인이 MSDS 작성·제출과 관련된 업무를 수행하는 데 있어 필요한 사항을 기술하고 있습니다. 이 안내서는 산업안전보건법(이하 법), 산업안전보건법 시행령(이하 시행령), 산업안전보건법 시행규칙(이하 시행규칙), 관련 고용노동부고시 및 타 법에서 규정하는 사항보다 우선할 수 없으며, 단순히 기술적인 사항을 안내하기 위한 자료입니다.

대체 화학물질명칭 및 함유량 작성 기준(Lexicon guide 적용) 안내서

[목차]

S- I. 대체자료 작성기준	1
S- I-1. 대체명칭 작성원칙	1
S- I-2. 대체명칭 작성기준	2
[Lexicon guide]	2
[Lexicon guide 적용 절차]	11
S- II. 대체자료 작성 절차 및 예시	12
S- II-1. 대체명칭 작성 및 확인	12
S- II-1. S1. 신청물질명칭 선택	13
S- II-1. S2. 물질 class, 모체 및 치환기를 구분하여 작용기 및 원소 확인	13
S- II-1. S3. 중요작용기 및 중요원소 결정	14
S- II-1. S4. 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 family/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용	16
(S- II-1. S5. 심사 시 신청물질명칭/대체명칭 적합성 검토)	18
S- II-2. 대체명칭 작성 예시	19
[Lexicon guide에 있는 적용 예시]	19
[물질 및 명칭별 Lexicon guide 적용 예시]	33
1. 탄소원자 사슬계물질의 모체 및 치환기	33
2. 고리계(지방족 모체 및 치환기/방향족 모체 및 치환기) 화학물질	34
3. “별첨”의 치환기	37
4. 고분자화합물 또는 반응생성물	39
5. 염(salts)	41
6. 서로 다른 사슬계화학물질, 고리계화학물질, 치환기(적용 안됨)	44
7. 금속원소, 할로겐원소	44
8. 금속, 비금속(C, N, O P, S) 및 할로겐원소를 제외한 원소	47
9. 생물학적 추출물질의 원료 및 공정	49
10. 화학적/광물 추출물질의 원료 및 공정	51
11. 효소(enzymes)	53
12. 오일류 또는 유사 원료로부터 얻은 물질(Petroleum, coke 및 coal 물질)	55
13. 입체화학 또는 이성질체 확인요소	57

S- II -3. 대체함유량 작성 및 확인	59
S- II -3. S-1. 신청물질함유량 구분	59
S- II -3. S2. 대체함유량 작성	59
(S- II -3. S3. 신청물질함유량/대체함유량 적합성 검토)	59

첨부자료

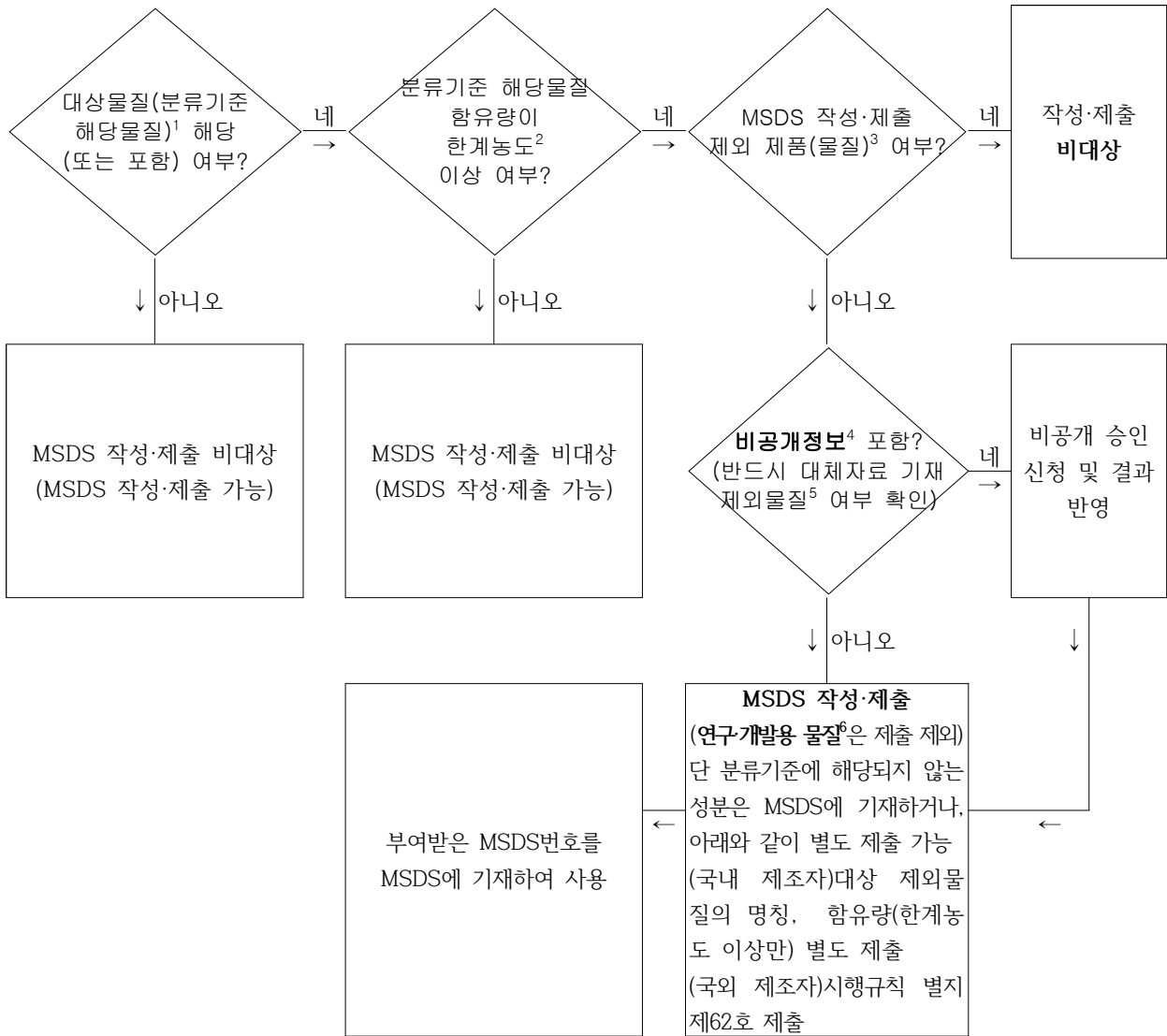
I. IUPAC 유기화합물 명명법(출처 ; 대한화학회)	63
II. IUPAC 명명법에 따른 SENIORITY ORDER FOR CLASSES (출처 ; IUPAC organic bluebook 2013)	65
III. Order of precedence of compound classes (출처 ; IUPAC organic bluebook 2013)68	
IV. Main Chemical Class and Sub-groups in Color Index (출처 ; Naming and Indexing of Chemical Substances for Chemical Abstracts 2007 edition)	69

별첨 부록

1. 오일류 또는 유사 원료로부터 얻은 물질(petroleum 물질)

화학물질 제조·수입자(이하 신청인)는 법 제104조 및 시행규칙 별표18 『유해인자의 유해성·위험성 분류기준』에 해당되는 물질(이하 대상물질)에 대한 물질안전보건자료(이하 MSDS)를 작성하여 공단의 MSDS 시스템을 통해 제출해야 합니다. 이때 대상물질의 명칭 및 함유량이 영업비밀과 관련된 경우 대체할 수 있는 명칭 및 함유량 정보(이하 대체자료)를 마련하여 비공개 승인 신청을 해야 합니다.

[MSDS 작성·제출 여부 판단 절차]



1. 대상물질 : 시행규칙 별표18 『유해인자의 유해성·위험성 분류기준』에 해당되는 물질
2. 한계농도 : 고용노동부고시 제2023-9호 『화학물질의 분류·표시 및 물질안전보건자료에 관한 기준』 제11조 제9항에 따른 MSDS 구성성분의 함유량 기재 기준
3. MSDS 작성·제출 제외 제품(물질) : 법 시행령(이하 영) 제86조에 따른 제품(물질)
4. 비공개정보 : 법 제112조에 따른 영업비밀과 관련된 화학물질의 명칭 및 함유량
5. 대체자료 기재 제외물질 : 고용노동부고시 제2023-9호 『화학물질의 분류·표시 및 물질안전보건자료에 관한 기준』 제16조에 따른 제조 등 금지물질, 허가대상물질, 관리대상유해물질, 작업환경측정 대상 유해인자, 특수건강진단 대상 유해인자, 화학물질의 등록 및 평가 등에 관한 법률 시행규칙 제35조 제2항 단서에서 정하는 화학물질
6. 연구·개발용 물질 : 고용노동부고시 제2023-9호 『화학물질의 분류·표시 및 물질안전보건자료에 관한 기준』 제19조에 따른 연구·개발용 물질

S- I. 대체자료 작성기준

신청인은 대체자료(대체명칭 및 대체함유량)를 작성기준에 따라 작성해야 합니다. 대체명칭은 환경부고시 제2018-237호 『자료보호신청서의 작성방법 및 보호자료 관리방법 등에 관한 규정』 별표 ‘총칭명의 명명방법’을 토대로 공단에서 추가한 부분을 적용하여 작성할 수 있습니다. 또한, EHCA Lexicon guide를 적용하여 작성할 수도 있습니다. 공단에서는 신청인이 제출한 명칭/대체명칭, 함유량/대체함유량을 각각 검토하여 그 적합성을 판단하게 되며, 부적합하거나 적합성 판단이 곤란한 대체자료의 경우 대체자료 작성기준을 근거로 하여 보완을 요청할 수 있습니다.

대체자료 기재형식

대체명칭

[기존 환경부 총칭명 및 공단 대체명칭 작성기준 적용]

- 첫째, 신청물질의 CAS No. 등을 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭 중 하나를 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.
- 둘째, 선택된 명칭에서 물질 부류(class), 원소(element), 모체명칭 및 치환기명칭을 구분하고, 구분된 부분명칭별로 대체할 부분을 선택합니다. 이때, 대체할 부분별로 대체명칭 작성기준이 적용 가능한지 확인하여 선택합니다.
- 셋째, 명칭 중 대체할 부분에는 대체명칭 작성기준을 적용하여 대체하고, 나머지 부분은 그대로 기재함으로써 대체명칭 작성을 완료합니다.

[Lexicon guide 적용]

- 첫째, 신청물질의 CAS No. 등을 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순위(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.
- 둘째, 선택된 명칭 및 분자구조에서 작용기(functional group) 및 원소(element)를 확인하고, 이 중 중요작용기(물질 class 등) 및 중요원소의 범위를 결정합니다.
- 셋째, 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 적용, 조합하여 대체명칭을 작성합니다.

대체함유량

- 첫째, 신청물질의 함유량을 고용노동부고시 제2023-9호 『화학물질의 분류·표시 및 물질안전보건자료에 관한 기준』 제17조 제5항 중 1호 또는 2호에 적용하여 대체함유량을 작성합니다.

S- I -1. 대체명칭 작성원칙

① 정보전달 관점에서 대체명칭을 통해 전달하는 정보는 분명해야 합니다. 물질을 위험 없이 취급할 수 있도록 준비하고, 작업장에서 필요한 건강 및 안전 예방조치를 취할 수 있도록 충분한 정보가 대체명칭을 통해 제공되어야 합니다.

② 대체명칭은 ‘S- II -1. S. 대체명칭 작성 및 확인 절차’를 준수해서 작성합니다.

S- I -2. 대체명칭 작성기준

본 안내서의 대체명칭 작성기준은 유럽연합에서 정하는 명명법 Lexicon guide*가 적용되었습니다.

* Part B of Annex VI to Regulation (EC) No 1272/2008 「Lexicon guide for establishing the alternative designations (generic names)」

[Lexicon guide]

대체명칭을 작성하기 위한 방법은 다음과 같습니다.

- ① 분자에 존재하는 작용기 및 화학원소를 확인합니다.
- ② 중요작용기 및 중요원소를 결정합니다.
- ③ 중요작용기 및 중요원소로부터 파생된 family/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다. 단, 하나의 family/sub-families 명칭만으로 중요작용기 및 중요원소가 충분히 포괄되지 않는 경우에는 다른 family/sub-families 명칭과 조합하여 작성할 수 있습니다.
 - ③-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별되는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학 원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families(001~103)명칭을 대체명칭으로 적용합니다.
 - ③-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별되는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families(601-650)명칭을 대체명칭으로 적용합니다.
 - ③-3 일부 금속과 같은 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 계열(families) 또는 하위계열(sub-families) 명칭에 ‘organic’ 또는 ‘inorganic’ 단어를 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.

[Division of substances into families and sub-families 목록]

Family No ▶ M8 Part 3 of Annex VI to Regulation (EC) No 1272/2008 ◀	Families Sub-families
001	Hydrogen compounds Hydrides
002	Helium compounds
003	Lithium compounds
004	Beryllium compounds
005	Boron compounds Boranes Borates

006	Carbon compounds Carbamates Inorganic carbon compounds Salts of hydrogen cyanide Urea and derivatives
007	Nitrogen compounds Quaternary ammonium compounds Acid nitrogen compounds Nitrates Nitrites
008	Oxygen compounds
009	Fluorine compounds Inorganic fluorides
010	Neon compounds
011	Sodium compounds
012	Magnesium compounds Organometallic magnesium derivatives
013	Aluminium compounds Organometallic aluminium derivatives
014	Silicon compounds Silicones Silicates
015	Phosphorus compounds Acid phosphorus compounds Phosphonium compounds Phosphoric esters Phosphates Phosphites Phosphoramides and derivatives
016	Sulphur compounds Acid sulphur compounds Mercaptans Sulphates Sulphites
017	Chlorine compounds Chlorates Perchlorates
018	Argon compounds
019	Potassium compounds
020	Calcium compounds
021	Scandium compounds
022	Titanium compounds

023	Vanadium compounds
024	Chromium compounds Chromium VI compounds
025	Manganese compounds
026	Iron compounds
027	Cobalt compounds
028	Nickel compounds
029	Copper compounds
030	Zinc compounds Organometallic zinc derivatives
031	Gallium compounds
032	Germanium compounds
033	Arsenic compounds
034	Selenium compounds
035	Bromine compounds
036	Krypton compounds
037	Rubidium compounds
038	Strontium compounds
039	Yttrium compounds
040	Zirconium compounds
041	Niobium compounds
042	Molybdenum compounds
043	Technetium compounds
044	Ruthenium compounds
045	Rhodium compounds
046	Palladium compounds
047	Silver compounds
048	Cadmium compounds
049	Indium compounds

050	Tin compounds Organometallic tin derivatives
051	Antimony compounds
052	Tellurium compounds
053	Iodine compounds
054	Xenon compounds
055	Caesium compounds
056	Barium compounds
057	Lanthanum compounds
058	Cerium compounds
059	Praseodymium compounds
060	Neodymium compounds
061	Promethium compounds
062	Samarium compounds
063	Europium compounds
064	Gandolinium compounds
065	Terbium compounds
066	Dysprosium compounds
067	Holmium compounds
068	Erbium compounds
069	Thulium compounds
070	Ytterbium compounds
071	Lutetium compounds
072	Hafnium compounds
073	Tantalum compounds
074	Tungsten compounds
075	Rhenium compounds
076	Osmium compounds

077	Iridium compounds
078	Platinum compounds
079	Gold compounds
080	Mercury compounds Organometallic mercury derivatives
081	Thallium compounds
082	Lead compounds Organometallic lead derivatives
083	Bismuth compounds
084	Polonium compounds
085	Astatine compounds
086	Radon compounds
087	Francium compounds
088	Radium compounds
089	Actinium compounds
090	Thorium compounds
091	Protactinium compounds
092	Uranium compounds
093	Neptunium compounds
094	Plutonium compounds
095	Americium compounds
096	Curium compounds
097	Berkelium compounds
098	Californium compounds
099	Einsteinium compounds
100	Fermium compounds
101	Mendelevium compounds
102	Nobelium compounds
103	Lawrencium compounds

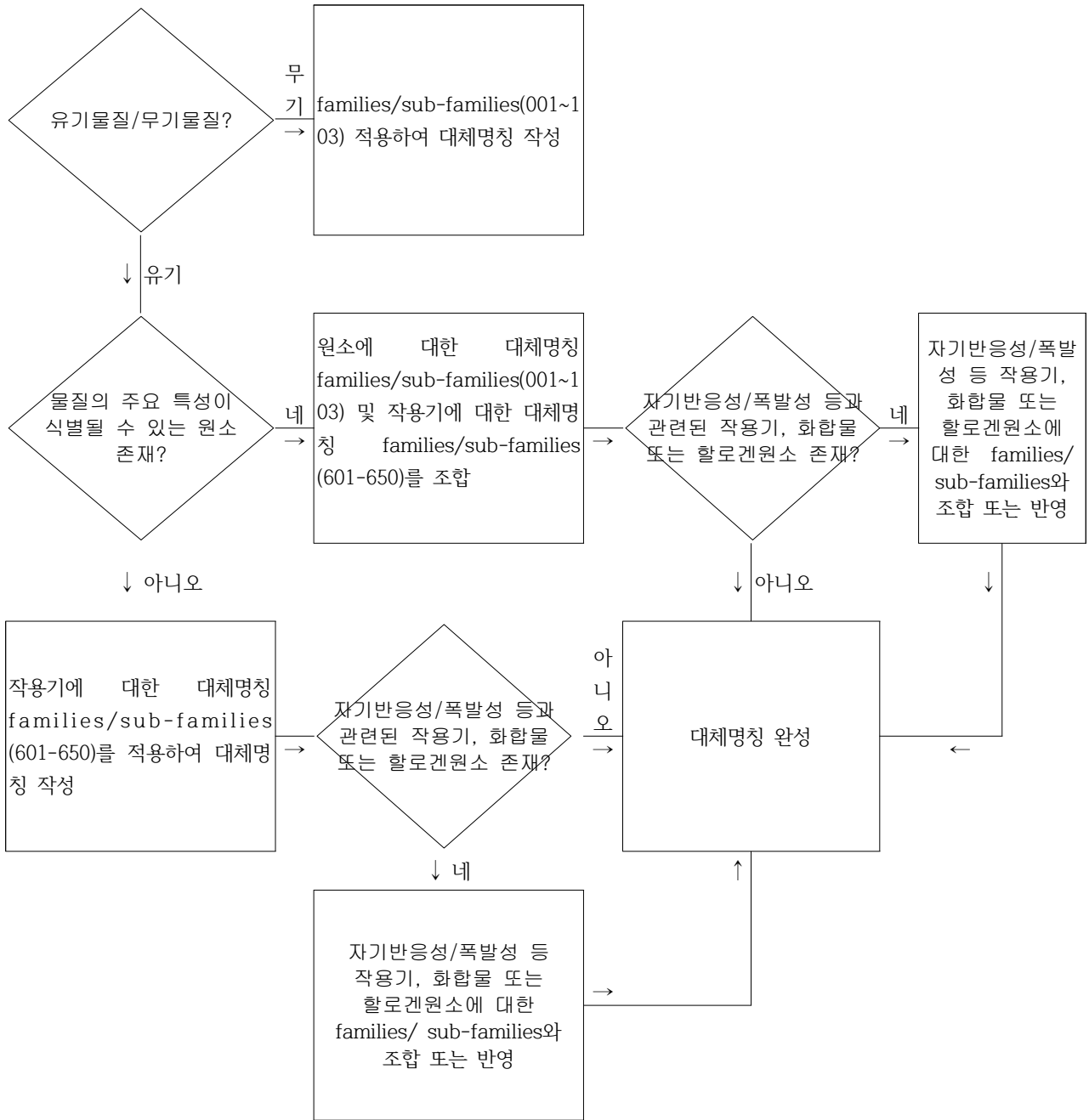
601	<p>Hydrocarbons</p> <ul style="list-style-type: none"> Aliphatic hydrocarbons Aromatic hydrocarbons Alicyclic hydrocarbons Polycyclic aromatic hydrocarbons(PAH)
602	<p>Halogenated hydrocarbons (*)</p> <ul style="list-style-type: none"> Halogenated aliphatic hydrocarbons (*) Halogenated aromatic hydrocarbons (*) Halogenated alicyclic hydrocarbons (*)
603	<p>Alcohols and derivatives</p> <ul style="list-style-type: none"> Aliphatic alcohols Aromatic alcohols Alicyclic alcohols Alcanolamines Epoxy derivatives Ethers Glycolethers Glycols and polyols
604	<p>Phenols and derivatives</p> <ul style="list-style-type: none"> Halogenated phenol derivatives (*)
605	<p>Aldehydes and derivatives</p> <ul style="list-style-type: none"> Aliphatic aldehydes Aromatic aldehydes Alicyclic aldehydes Aliphatic acetals Aromatic acetals Alicyclic acetals
606	<p>Ketones and derivatives</p> <ul style="list-style-type: none"> Aliphatic ketones Aromatic ketones (**) Alicyclic ketones
607	<p>Organic acids and derivatives</p> <ul style="list-style-type: none"> Aliphatic acids Halogenated aliphatic acids (*) Aromatic acids Halogenated aromatic acids (*) Alicyclic acids Halogenated alicyclic acids (*) Aliphatic acid anhydrides Halogenated aliphatic acid anhydrides (*) Aromatic acid anhydrides Halogenated aromatic acid anhydrides (*) Alicyclic acid anhydrides Halogenated alicyclic acid anhydrides (*) Salts of aliphatic acid Salts of halogenated aliphatic acid (*) Salts of aromatic acid

	Salts of halogenated aromatic acid (*) Salts of alicyclic acid Salts of halogenated alicyclic acid (*) Esters of aliphatic acid Esters of halogenated aliphatic acid (*) Esters of aromatic acid Esters of halogenated aromatic acid (*) Esters of alicyclic acid Esters of halogenated alicyclic acid (*) Esters of glycol ether Acrylates Methacrylates Lactones Acyl halogenides
608	Nitriles and derivatives
609	Nitro compounds
610	Chlornitrated compounds
611	Azoxy and azo compounds
612	Amine compounds Aliphatic amines and derivatives Alicyclic amines and derivatives Aromatic amines and derivatives Aniline and derivatives Benzidine and derivatives
613	Heterocyclic bases and derivatives Benzimidazole and derivatives Imidazole and derivatives Pyrethrinoids Quinoline and derivatives Triazine and derivatives Triazole and derivatives
614	Glycosides and alkaloids Alkaloid and derivatives Glycosides and derivatives
615	Cyanates and isocyanates Cyanates Isocyanates
616	Amides and derivatives Acetamide and derivatives Anilides
617	Organic peroxides
647	Enzymes

648	<p>Complex coal derivatives</p> <ul style="list-style-type: none"> Acid extract Alkaline extract Anthracene oil Anthracene oil extract residue Anthracene oil fraction Carbolic oil Carbolic oil extract residue Coal liquids, liquid solvent extraction Coal liquids, liquid solvent extraction solvents Coal oil Coal tar Coal tar extract Coal tar solids residue Coke (coal tar) low temperature, high temperature pitch Coke (coal tar), high temperature pitch Coke (coal tar), mixed coal high temperature pitch Crude benzole Crude phenols Crude tar bases Distillate bases Distillate phenols Distillates Distillates (coal), liquid solvent extraction, primary Distillates (coal), solvent extraction, hydrocracked Distillates (coal), solvent extraction, hydrocracked hydrogenated middle Distillates (coal), solvent extraction, hydrocracked middle Extract residues (coal), low temperature coal tar alkaline Fresh oil Fuels, diesel, coal solvent extraction, hydrocracked, hydrogenated Fuels, jet aircraft, coal solvent extraction, hydrocracked, hydrogenated Gasoline, coal solvent extraction, hydrocracked naphtha Heat treatment products Heavy anthracene oil Heavy anthracene oil redistillate Light oil Light oil extract residues, high boiling Light oil extract residues, intermediate boiling Light oil extract residues, low boiling Light oil redistillate, high boiling Light oil redistillate, intermediate boiling Light oil redistillate, low boiling Methylnaphthalene oil Methylnaphthalene oil extract residue Naphtha (coal), solvent extraction, hydrocracked
-----	---

	<p>Naphthalene oil Naphthalene oil extract residue Naphthalene oil redistillate Pitch Pitch redistillate Pitch residue Pitch residue, heat treated Pitch residue, oxidised Pyrolysis products Redistillates Residues (coal), liquid solvent extractions Tar brown coal Tar brown coal, low temperature Tar oil, high boiling Tar oil, intermediate boiling Wash oil Wash oil extract residue Wash oil redistillate</p>
649	<p>Complex oil derivatives Crude oil Petroleum gas Low boiling point naphtha Low boiling point modified naphtha Low boiling point cat-cracked naphtha Low boiling point cat-reformed naphtha Low boiling point thermally cracked naphtha Low boiling point hydrogen treated naphtha Low boiling point naphtha – unspecified Straight-run kerosine Kerosine – unspecified Cracked gas oil Gas oil – unspecified Heavy fuel oil Grease Unrefined or mildly refined base oil Base oil – unspecified Distillate aromatic extract Distillate aromatic extract (treated) Foots oil Slack wax Petrolatum</p>
650	<p>Various substances Do not use this family. Instead, use the families or sub-families mentioned above.</p>
<p>(*) Specify according to the family corresponding to halogen. (**) Quinones included.</p>	

[Lexicon guide 적용 절차]



S- II. 대체자료 작성 절차 및 예시

신청인은 대체자료 작성 시 기재형식을 준수해야 합니다. 작성된 대체자료는 공단의 물질안전보건자료시스템을 통해 비공개 승인 신청 시 신청물질의 명칭 및 함유량과 함께 제출합니다.

공단은 비공개 승인 신청물질의 명칭/대체명칭과 함유량/대체함유량에 대한 적합성 판단을 진행합니다. 이때 대체자료가 작성기준에 적합하지 않거나, 적합성 판단이 곤란한 경우 보완요청을 할 수 있습니다.

S- II -1. 대체명칭 작성 및 확인

신청인은 신청물질의 명칭/대체명칭을 다음 기재형식에 맞게 작성하고, 공단에서는 대체명칭이 기재형식에 맞는지 확인합니다.

S- I -1. R1. Lexicon guide 적용 대체명칭 기재형식

첫째, 신청물질의 CAS No. 등을 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순위(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.

둘째, 선택된 명칭 및 분자구조에서 작용기(functional group) 및 원소(element)를 확인하고, 이 중 중요작용기(물질 class 등) 및 중요원소(들)의 범위를 결정합니다.

셋째, 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 적용, 조합하여 대체명칭을 작성합니다.

[예시]

연번	신청물질		대체		대체자료 적용기준	
	명칭	함유량	명칭	함유량	명칭	함유량
1	2-Ethyl pentane	20%	Aliphatic hydrocarbon	10~30%	Lexicon guide 601	고용노동부고시 제2023-9호 제17조 제5항 제1호
2	Butane -1,4-dithiol	30%	Glycol	10~50%	Lexicon guide 603	고용노동부고시 제2023-9호 제17조 제5항 제1호

신청물질명칭/대체명칭은 다음 절차와 같이 작성 또는 확인합니다.

S-II-1. S. 대체명칭 작성 및 확인 절차

S-II-1. S1. 신청물질의 IUPAC명칭(또는 CAS 명칭)을 선택

S-II-1. S2. 물질 class, 모체 및 치환기를 구분하여 작용기 및 원소 확인

S-II-1. S3. 중요작용기 및 중요원소 결정

S-II-1. S4. 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 family/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용

S-II-1. S5. 심사 시 신청물질명칭/대체명칭의 적합성 검토

S-II-1. S1. 신청물질명칭 선택

화학물질의 명칭은 상품명, 물질별 제조사협회의 명명법(예; SDA, IUBMB 등)에 따라 개별적으로 명명되어 오다가, 점차 다양화되고 복잡해진 물질구조 등에 맞춰 IUPAC, CAS 등과 같은 체계적인 명명법에 의해 명명되고 있습니다. CAS에서는 ECHA 및 EPA의 등록물질 명칭, 논문에 실린 물질명칭 등을 수집하여 CAS No.라고 하는 식별번호를 부여해 서비스하고 있습니다. 현재 하나의 CAS No.에는 과거부터 여러 명명체계를 통해 만들어진 다양한 명칭이 존재합니다. 신청인은 CAS scifinder, ECHA, pubchem, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 CAS No.로 검색된 명칭 중 IUPAC 명칭(또는 CAS 명칭)을 선택해야 합니다. 이때, IUPAC 명명법(또는 CAS 명명법)에 적합하지 않는 명칭은 선택할 수 없습니다. 또한, 반응물 또는 단량체 등이 나열된 명칭(A reaction product with B and C 등)과 같이 분자구조에 따라 명명된 명칭이 아닌 경우에는 Lexicon guide를 적용하는 대신에 기존 환경부의 총칭명 또는 공단의 대체명칭 작성기준을 적용해야 합니다. 단, 효소(Enzyme) 및 석유물질(Naphtha 등)은 Lexicon guide를 적용할 수 있습니다.

① CAS No. 등의 식별번호 또는 명칭이 있는 물질의 경우에는 CAS scifinder, ECHA, pubchem, NCIS 등의 웹을 통해 IUPAC 명명법(또는 CAS 명명법)에 따라 작성된 IUPAC 명칭(또는 CAS 명칭)을 검색·선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.

② CAS No. 등의 식별번호 또는 IUPAC 명칭(또는 CAS 명칭)이 없는 물질의 경우에는 IUPAC 명명법(또는 CAS 명명법)에 따라 명칭을 별도로 작성해야 합니다.

S-II-1. S2. 물질 class, 모체 및 치환기를 구분하여 작용기 및 원소 확인

IUPAC 명칭(또는 CAS 명칭) 및 분자구조 등을 통해 작용기 및 화학원소를 확인하고, IUPAC 명칭의 class 접미사(어), 모체, 접두사(어), 치환기 등을 구분합니다.

① 신청물질의 명칭 및 분자구조에서 물질 class, 모체 및 치환기를 다음과 같이 구분합니다.

- IUPAC 명명법의 경우 “접두사(어)-모체-접미사(어)”와 같은 순서로 명명되며, CAS 명명법은 “모체-접미사(어)-접표-접두사(어)” 순서로 명명되어 있습니다.

예시	
IUPAC	CAS
3-bromo-1,4-dichlorobutan-2-ol	2-butanol, 3-bromo-1,4-dichloro-

- IUPAC 명명법에서 접두사(어)는 치환기를 나타내며, 유기화합물에서 치환기란 모체의 수소원자를 대치한 원자 혹은 원자단을 의미합니다. 치환기 명칭에는 대체로 ‘-yl’, ‘-no’, ‘-ro’ 및 ‘-y’와 같은 어미가 끝에 붙습니다.

- 모체는 주사슬(principal chain) 혹은 주고리계(principal cycle)를 의미합니다.

- 접미사(어)는 물질의 class를 의미하며, 주원자단을 표시합니다. 물질의 class는 작용기(characteristic group 또는 functional group)의 존재에 의하여 정해집니다. 여러 개의 작용기가 존재하는 경우 가장 우선순위가 높은 작용기가 주원자단이 되고, 나머지 작용기는 치환기로서 접두사(어)에 배치됩니다. 작용기로는 탄소-탄소 결합으로 연결된 기를 제외한 -OH, -NH₂, -COOH, -(F, Cl, Br, I), =O, =N 등이 있습니다.

S-II-1. S3. 중요작용기 및 중요원소 결정

확인된 여러 작용기 및 원소들 중에서 중요작용기 및 중요원소를 결정합니다. IUPAC 명칭(CAS 명칭)에서는 주로 접미사(어) 및 모체에서 중요작용기 및 중요원소가 결정됩니다. 참고로, 일부 CAS 명칭에서는 class 접미사(어)명칭으로 ether를 사용하는 대신에 oxy라는 치환기 명칭을 사용하기 때문에 접미사(어)에서 ether를 확인할 수 없는 경우도 있습니다. (출처 ; Naming and Indexing of Chemical Substances for Chemical Abstracts 2007 ¶ 241). 하지만 Lexicon guide에서는 ether를 별도 sub-family로 구분하고 있기 때문에 분자 내 ether 구조가 있는 경우에는 Lexicon guide의 sub-family(603) ethers 및 Glycoethers를 적용해야 합니다.

① IUPAC 명칭(CAS 명칭)의 접미사(어)는 물질의 class 우선순위에 따라 명명됩니다. 따라서 주로 접미사(어) 및 모체에서 중요작용기 및 중요원소가 결정됩니다.

② IUPAC 명칭(CAS 명칭)에서 접미사(어)를 제외한 접두사(어)(prefix) 등에 있는 작용기는 중요작용기로 결정하지 않을 수 있습니다. 다만, 자기반응성/폭발성 등과 관련된 작용기*의 경우에는 중요작용기에 포함시키고, 해당 families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용해야 합니다. 또한, Lexicon guide의 특정 families/sub-families**에 해당하는 화합물의 경우에도 해당 families/sub-families 명칭을 대체명칭에 추가 적용해야 합니다.

* DGR(edition 63) ‘APPENDIX C-currently assigned substances’에 따른, 자기반응성 그룹 및 organic peroxides

azo-, diazo-, azide-, azonium-, hydrazide-, nitro(so)- 및 organic peroxide

*** Guidance on the Application of the CLP Criteria Version 5.0(July 2017)에 따른, 유기물질 내 폭발성 그룹**

C-Metal, N-Metal (e.g. Grignard reagents, organo-lithium compounds), Contiguous nitrogen atoms (e.g. azides, aliphatic azo compounds, diazonium salts, hydrazines, sulphonylhydrazides), Contiguous oxygen atoms (e.g. peroxides, ozonides), N-O(e.g. hydroxyl amines, nitrates, nitro compounds, nitroso compounds, N-oxides, 1,2-oxazoles), N-halogen (e.g. chloramines, fluoroamines), O-halogen (e.g. chlorates, perchlorates, iodosyl compounds)

**** Lexicon guide의 특정 sub-families**

Phenol(604), Nitriles(608), nitro(609), Chlornitrated(610), azoxy(611), azo(611), Aniline(612), Benzidine(612), Benzimidazole(613), Imidazol(613), Quinoline(613), Triazine(613), Triazole(613), cyanate(615), isocyanate(615), Acetamide(616), Anilide(616), organic peroxide(617)

※ 분자구조를 확인할 수 없는 일부 color index 표기물질(안료 등)의 경우에는 첨부 IV ‘Main Chemical Class and Sub-groups in Color Index’의 Main Chemical Class를 참고하여 자기 반응성 및 폭발성 구조를 확인할 수 있습니다.

③ 대체자료기재제외물질 목록*에 있는 모든 금속원소는 중요원소로 결정하고, 해당 families/sub-families 명칭을 대체명칭 작성 시 적용시켜야 합니다.

* 고용노동부고시 「화학물질의 분류·표시 및 물질안전보건자료에 관한 기준」 제16조제1호~제5호

④ 다음과 같은 형식의 명칭은 중요작용기 및 중요원소를 결정할 수 없기 때문에 Lexicon guide를 적용할 수 없고, 기존의 환경부의 총칭명 또는 공단의 대체명칭 작성기준을 적용해야 합니다. 다만, 반응결과물질(들)의 작용기 및 원소를 확인할 수 있는 분자구조(들) 및 명칭(들)을 함께 제출하는 경우에는 Lexicon guide를 적용할 수 있습니다.

- ‘고분자화합물(A polymer with B and C) 또는 반응생성물(A reaction product with B and C)’ 형식의 명칭

예시:

name	CAS no
Formaldehyde, polymer with 4-(1,1-dimethylethyl)phenol	25085-50-1

- ‘생물학적 추출물질의 원료 및 공정’ 형식의 명칭

예시:

name	CAS no
Oxidized logwood extract	90294-88-5

- ‘화학적/광물 추출물질의 원료 및 공정’ 형식의 명칭

예시:

name	CAS no
Hydrocarbon waxes (petroleum), oxidized, calcium salts	68603-09-8

⑤ 만약, 중요작용기 및 중요원소에 있어 신청인과 공단 사이에 이견이 발생하는 경우 신청인은 중요작용기 및 중요원소에 대한 신뢰 있는 근거를 출처와 함께 제시할 수 있습니다.

S-II-1. S4. 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 family/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용

중요작용기 및 중요원소에 해당하는 family/sub-families 명칭을 통해 대체명칭을 작성합니다.

① 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별되는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질

- 화학 원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families(001~103)명칭을 대체명칭에 적용합니다. 예를 들어, Triethylgallium(CAS No. 1115-99-7)은 물질의 주요 특성이 Ga원소를 통해 식별되기 때문에 families 명칭은 Gallium compounds(031)가 되며, 대체명칭은 families 명칭에 Triethyl을 포괄하는 'Organic'을 추가하여 Organic gallium compound가 될 수 있습니다.

예시:

name	generic name	CAS no
Triethylgallium	Organic gallium compound	1115-99-7

② 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별되는 유기(organic)물질

- 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families(601-650)명칭을 대체명칭에 적용합니다. 예를 들어, 1-Hexanol(CAS No. 111-27-3)은 물질의 주요 특성이 작용기 -ol(Alcohol)로 식별되기 때문에 families 명칭은 Alcohols and derivatives이고, sub-families 명칭은 Aliphatic alcohols(603)가 됩니다. 따라서 대체명칭은 sub-families 명칭 그대로 Aliphatic alcohol이 될 수 있습니다.

예시:

name	generic name	CAS no
1-Hexanol	Aliphatic alcohol	111-27-3

- Carboxylic acid 등과 같이 organic acid(carbon oxalic acid) 및 그 유도체의 경우에는 families/sub-families (601-650)명칭을 적용하고, sulfonic acid 등과 같은 inorganic acid(Noncarbon oxalic acid) 및 그 유도체의 경우에는 organic 화학물의 작용기가 아니기 때문에 families/sub-families(001~103) 명칭을 적용합니다.

예를 들어, 4-sulfobenzoic acid(CAS No. 636-78-2)에서 class 접미사(어) carboxylic acid는 organic acid(carbon oxalic acid)에 해당되기 때문에 families/sub-families(601-650)를 적용

합니다. 따라서 carboxylic acid는 중요작용기의 family인 Organic acids and derivatives(607)이고, sub-family는 방향족(aromatic) 모체 benzene을 포괄하는 aromatic acids가 됩니다. 따라서 대체명칭은 sub-families 명칭 그대로 Aromatic acid가 될 수 있습니다.

예시:

name	generic name	CAS no
4-Sulfobenzoic acid	Aromatic acid	636-78-2

이와 달리 Benzenesulfonic acid(CAS No. 98-11-3)에서 class 접미사(어) sulfonic acid는 inorganic acid(noncarbon oxalic acid)에 해당되기 때문에 families/sub-families(001~103)를 적용합니다. 따라서 sulfonic acid는 중요원소 S(Sulphur)의 family인 Sulphur compounds(016)와 sub-family는 Acid sulphur compounds가 됩니다. 여기에서 모체 Benzene을 포괄하는 'organic'을 추가함으로써 대체명칭은 Acid sulphur organic compound가 될 수 있습니다.

예시:

name	generic name	CAS no
Benzenesulfonic acid	Acid sulphur organic compound	98-11-3

③ 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 family/sub-families 명칭들을 조합하여 대체명칭에 적용 만약, 하나의 family/sub-families 명칭만으로 중요작용기 및 중요원소가 충분히 포괄되지 않는 경우에는 다른 family/sub-families 명칭과 조합하여 작성할 수 있습니다.

예를 들어, 2-Chloro-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-benzenecarboxylic acid(CAS No. 220141-15-1)에서 중요작용기(carboxylic acid) 및 모체(benzene)를 충족하는 family명칭은 'Organic acids and derivatives(607)'이며, benzene과 같은 방향족(aromatic) 모체와 '2-chloro'를 함께 충족하는 sub-family는 'Halogenated aromatic acids(607)'입니다. 하지만, 분자 내에는 Lexicon guide의 특정 sub-families에 해당하는 triazol 중요작용기가 있기 때문에, 이에 해당하는 sub-family 'Triazole and derivatives(613)' 명칭도 대체명칭에 적용해야 합니다. 2가지 sub-families 명칭 'Halogenated aromatic acids'와 'Triazole and derivatives'를 조합하여 'Triazoleyl halogenated aromatic acid'와 같은 대체명칭을 작성할 수 있습니다.

예시:

name	generic name	CAS no
2-Chloro-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-benzenecarboxylic acid	Triazoleyl halogenated aromatic acid	220141-15-1

④ 일부 금속 등 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 화합물의 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭 작성

예를 들어, Dithionous acid, sodium salt(CAS No. 7775-14-6)에서 중요원소(S) 및 모체를 충족하는 family명칭은 'Sulphur compounds(016)'입니다. 이때, Dithionous acid는 organic 화

합물의 작용기가 아니므로 중요작용기의 families/sub-families(601-650)를 적용하지 않고, 중요 원소의 families/sub-families(001-103)를 적용합니다. 다음 sodium과 같은 금속 등의 특정 원소가 포함된 경우 화합물의 종류에 따라 'Inorganic'을 추가하여 'Inorganic sulphur compound'와 같은 대체명칭을 작성할 수 있습니다.

예시:

name	generic name	CAS no
Dithionous acid, sodium salt	Inorganic sulphur compound	7775-14-6

(S-II-1. S5. 심사 시 신청물질명칭/대체명칭 적합성 검토)

공단에서는 대체자료 적합성 심사 시 신청물질명칭 대비 대체명칭의 적합성을 검토합니다.

① 신청물질의 명칭이 적합한 지 확인합니다.

- CAS No. 등 식별번호가 있는 경우 CAS scifinder, ECHA, pubchem, NCIS 등의 화학물질 검색사이트에서 제출한 신청물질명칭이 검색되는지 확인하고, 그 명칭이 IUPAC(또는 CAS) 명명법에 의한 명칭인지 확인합니다. 만약, 명칭이 검색되지 않거나, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등에 대해서는 보완을 통해 적합한 명칭을 요청할 수 있습니다.

- CAS No. 등 식별번호가 없는 경우 제출한 신청물질명칭이 IUPAC 또는 CAS 명명법에 의한 명칭인지 확인합니다. 이때 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등으로 작성된 명칭에 대해서는 보완을 통해 적합한 명칭을 요청할 수 있습니다. 만약, 제출된 신청물질명칭이 CAS scifinder, ECHA, pubchem, NCIS 등의 화학물질검색사이트에서 식별번호와 함께 검색되는 경우에는 보완을 통해 신청물질의 식별번호가 맞는지 확인할 수 있습니다.

② 신청물질명칭과 대체명칭을 비교하여 Lexicon guide 작성기준이 적합하게 적용되었는지 아래 절차에 따라 확인합니다.

- S-II-1. S1. 신청물질의 IUPAC명칭(또는 CAS 명칭) 여부
- S-II-1. S2. 물질 class, 모체 및 치환기를 구분하여 작용기 및 원소 확인
- S-II-1. S3. 중요작용기 및 중요원소 확인
- S-II-1. S4. 중요작용기 및 중요원소의 family/sub-families 명칭을 통해 작성된 대체명칭 적합성 여부

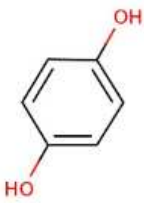
③ 대체명칭이 적합하지 않은 경우 공단의 대체자료 심사 절차에 따라 '서류보완사항 기재서'를 작성하여 보완기간(최초 10일)과 함께 신청인에게 보완을 요청할 수 있습니다(보완기간은 심사기간에 산입되지 않습니다.)

- 단, 신청인이 다른 제품에 기 승인된 대체명칭을 신청제품에도 동일하게 적용하고자 하는 경우, 그 적합성을 검토하여 승인할 수 있습니다.

S- II -2. 대체명칭 작성 예시

[Lexicon guide에 있는 적용 예시]

예시 : CAS No. 123-31-9


대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>1,4-Benzenediol</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : phenol 원소 : O, C, H 모체 : Benzene</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기(class) : phenol 중요원소 : - 모체 : Benzene</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : phenol family : Phenols and derivatives(604) (분자 내 Benzenediol은 hydroxy와 phenyl이 직접 결합하고 있으므로 IUPAC class 접미사(어) phenol에 해당하는 organic 화합물이며 이를 충족하는 family는 Phenols and derivatives(604)입니다.) 중요원소 : -</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 Phenols and derivatives를 적용하여 작성한 대체명칭은 Phenol derivatives입니다. (단일물질인 경우 s 삭제)</p>

단, 1,4-Benzenediol은 대체자료기재제외물질에 해당되기 때문에 대체명칭을 작성할 수 없고, 원래명칭을 MSDS에 기재해야 합니다.

▶ Phenol derivative

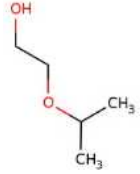
▶ 1,4-Benzenediol

예시 : CAS No. 71-36-3

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>1-Butanol</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : ol(alcohol) 원소 : O, C, H 모체 : Butane</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기(class) : ol(alcohol) 중요원소 : - 모체 : Butane</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다.</p> <p>④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다.</p> <p>④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : ol(alcohol) family : 603 Alcohols and derivatives sub-family : Aliphatic alcohols (분자 내 Butanol은 IUPAC class 접미사(어) -이과 모체 Butane으로 구성된 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Alcohols and derivatives(603)이고, sub-family는 Aliphatic alcohols입니다.) 중요원소 : -</p>

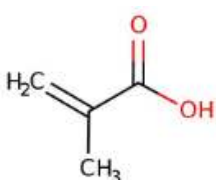
▼	▼
<p>⑤ 대체명칭 작성</p> <p>확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 Aliphatic alcohols를 적용하여 작성한 대체명칭은 Aliphatic alcohol입니다. (단일물질인 경우 s 삭제)</p> <p>단, 1,4-Benzenediol은 대체자료기재제외물질에 해당되기 때문에 대체명칭을 작성할 수 없고, 원래명칭을 MSDS에 기재해야 합니다.</p> <p>▶ Aliphatic alcohol ▶ 1-Butanol</p>

예시 : CAS No. 109-59-1

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택</p> <p>CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Ethanol, 2-(1-methylethoxy)- (=2-Isopropoxyethanol)</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인</p> <p>신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : ol(alcohol), ether 원소 : O, C, H 모체 : Ethane</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정</p> <p>신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기(class) : ol(alcohol), ether 중요원소 : - 모체 : Ethane</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용</p> <p>중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다.</p> <p>④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : ol(alcohol), ether family : 603 Alcohols and derivatives sub-family : Glycoethers (분자 내 Ethanol은 IUPAC class 접미사(어) -ol과 모체 Ethane으로 구성된 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Alcohols and derivatives(603)이고, 분자 내 -ol(hydroxy) 및 oxy도 모두 충족하는 적합한 sub-family는 glycoethers입니다.) 중요원소 : -</p>

<p>④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 glycoethers를 적용하여 작성한 대체명칭은 Glycoether입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) ▶ Glycoether</p>

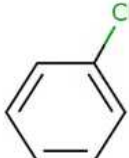
예시 : CAS No. 79-41-4

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>2-Propenoic acid, 2-methyl- (=Methacrylate)</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : (carboxylic) acid 원소 : O, C, H 모체 : Propane</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기(class) : (carboxylic) acid 중요원소 : - 모체 : Propane</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학</p>	<p>중요작용기 : (carboxylic) acid family : 607 Organic acids and derivatives sub-family : Acrylates (분자 내 Propenoic acid는 IUPAC class 접미사(어) (carboxylic) acid와 모체 propane로 구성된 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Organic acids and derivatives(607)이고, sub-family는 Acrylates입니다.) 중요원소 : -</p>

<p>원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다.</p> <p>④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	
<p>⑤ 대체명칭 작성</p> <p>확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 Acrylates를 적용하여 작성한 대체명칭은 Acrylate입니다. (단일물질인 경우 s 삭제)</p> <p>▶ Acrylate</p>


하나의 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭으로 모든 중요작용기와 원소가 정확하게 포괄(표현)되지 않은 경우 여러 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 조합하여 대체명칭을 작성한 예시

예시 : CAS No. 108-90-7

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택</p> <p>CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Benzene, chloro- (=Chlorobenzene)</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인</p> <p>신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : Benzene 원소 : Cl, C, H 모체 : Benzene</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정</p> <p>신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>작용기(class) : Benzene 중요원소 : Cl 모체 : Benzene</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용</p> <p>중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하</p>	<p>중요작용기 : Aromatic hydrocarbons, chlorinated family : Halogenated hydrocarbons(602) sub-family : Halogenated aromatic hydrocarbons</p>

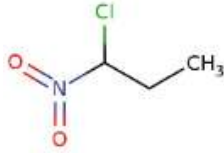
<p>는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다.</p> <p>④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학 원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다.</p> <p>④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>(분자 내 Benzene은 IUPAC class가 Carbon compounds(rings)인 organic 화합물이고, chloro는 halogen원자 치환기이므로, 이를 충족하는 family는 Halogenated hydrocarbons(602)입니다. 이에 더해, 모체 benzene은 aromatic(방향족) hydrocarbon이므로 적합한 sub-family는 Halogenated aromatic hydrocarbons입니다.)</p> <p>중요원소 : Cl family : Chlorine compounds(017) (중요원소 Cl을 충족하는 family는 Chlorine compounds(017)입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성</p> <p>확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>2개의 family/sub-family 명칭 Halogenated aromatic hydrocarbons 및 Chlorine compounds를 조합하여 작성한 대체명칭은 Chlorinated aromatic hydrocarbon입니다.</p> <p>(단일물질인 경우 s 삭제)</p> <p>단, Benzene, chloro-는 대체자료기재제외물질에 해당되기 때문에 대체명칭을 작성할 수 없고, 원래명칭을 MSDS에 기재해야 합니다.</p> <p>▶ Chlorinated aromatic hydrocarbon ▶ Benzene, chloro-</p>

예시 : CAS No. 85-34-7

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택</p> <p>CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Benzeneacetic acid, 2,3,6-trichloro- (=2,3,6-trichlorobenzeneacetic acid)</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인</p> <p>신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : (carboxylic) acid 원소 : Cl, O, C, H 모체 : Benzene, ethane(acetic의 ethane)</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정</p> <p>신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결</p>	<p>중요작용기(class) : (carboxylic) acid 중요원소 : Cl 모체 : Benzene, ethane(acetic의 ethane)</p>

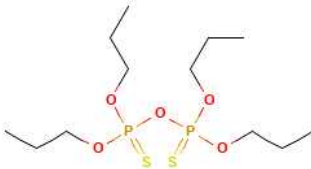
<p>정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	
<p style="text-align: center;">▼</p> <p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p style="text-align: center;">▼</p> <p>중요작용기 : (carboxylic) acid family : Organic acids and derivatives(607) sub-family : Halogenated aromatic acids (분자 내 Benzeneacetic acid는 IUPAC class 접미사(어) (carboxylic) acid와 모체 benzene 및 ethane으로 구성된 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Organic acids and derivatives(607)입니다. 이에 더해, 모체 benzene이 aromatic(방향족) hydrocarbon이므로 적합한 sub-family는 Halogenated aromatic acids입니다.) 중요원소 : Cl family : Chlorine compounds(017) (중요원소 Cl을 충족하는 family는 Chlorine compounds(017)입니다.)</p>
<p style="text-align: center;">▼</p> <p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p style="text-align: center;">▼</p> <p>2개의 family/sub-family 명칭 Halogenated aromatic acids 및 Chlorine compounds를 조합하여 작성한 대체명칭은 Chlorinated aromatic acids입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) ▶ Chlorinated aromatic acid</p>

예시 : CAS No. 600-25-9

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Propane, 1-chloro-1-nitro- (=1-Chloro-1-nirtopropane)</p> 
<p style="text-align: center;">▼</p> <p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p style="text-align: center;">▼</p> <p>작용기 : chloro-nitro, Propane 원소 : Cl, O, N, C, H 모체 : Propane</p>
<p style="text-align: center;">▼</p> <p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경</p>	<p style="text-align: center;">▼</p> <p>중요작용기(class) : Propane, chloro-nitro(Chlorinitrated) 중요원소 : - 모체 : Propane</p>

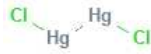
<p>우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	
<p>▼</p> <p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>▼</p> <p>중요작용기 : chloro-nitro(Chlornitrated) family : Chlornitrated compounds(610) (분자 내 chloro-nitro의 구조를 포괄하는 family는 Chlornitrated compounds(601)입니다.) 중요작용기 : Propane family : Hydrocarbons(601) sub-family : Aliphatic hydrocarbons (분자 내 Propane은 IUPAC class가 Carbon compounds(chains)인 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Hydrocarbons(601)입니다. 이에 더해, 모체 Propane은 aliphatic(지방족) hydrocarbon이므로 적합한 sub-family는 Aliphatic hydrocarbons입니다.)</p>
<p>▼</p> <p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>▼</p> <p>2개의 family/sub-family 명칭 Chlornitrated compounds 및 Aliphatic hydrocarbons를 조합하여 작성한 대체명칭은 Chlornitrated aliphatic hydrocarbon입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) ▶ Chlornitrated aliphatic hydrocarbon</p>

예시 : CAS No. 3244-90-4

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Thiodiphosphoric acid, tetrapropyl ester (=Tetrapropyl dithiopyrophosphate)</p> 
<p>▼</p> <p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>▼</p> <p>작용기 : ester(acid 유도체) 원소 : P, S, O, C, H 모체 : phosphoric ester(phosphate)</p>
<p>▼</p> <p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용</p>	<p>▼</p> <p>중요작용기 : - (Phosphoric acid, ester는 noncarbon acid이므로</p>

<p>기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>organic 화합물의 중요작용기를 적용하지 않고, 중요원소 P의 family를 적용합니다.) 중요원소 : P, S 모체 : phosphoric ester(phosphate)</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : - 중요원소 : P family : Phosphorus compounds(015) sub-family : Phosphoric esters (분자 내 Phosphoric acid, ester는 organic 화합물의 중요작용기가 아니기 때문에 중요원소 P의 family인 Phosphorus compounds(015)를 적용합니다. 이에 더해, IUPAC class 접미사(어) ester(acid 유도체)를 충족하는 sub-family는 Phosphoric esters입니다.) 중요원소 : S (중요원소 S를 충족하는 family는 Sulphur compounds(016)입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>2개의 family/sub-family 명칭 Phosphoric esters 및 Sulphur compounds를 조합하여 작성한 대체명칭은 Thiophosphoric ester입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) (sulphur는 원래명칭에 있는 thio(sulphur의 치환기 명칭)를 그대로 기재할 수 있습니다.)</p> <p>▶ Thiophosphoric ester</p>

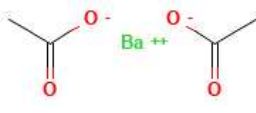
예시 ; CAS No. 10112-91-1

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Mercury chloride </p>
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인함</p>	<p>작용기 : - 원소 : Hg, Cl</p>

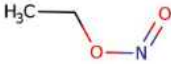
니다.	모체 : Mercury chloride
▼	▼
③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.	중요작용기 : - 중요원소 : Hg, Cl 모체 : Mercury chloride
▼	▼
④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.	중요원소 : Hg family : Mercury compounds(080) (중요원소 Hg를 충족하는 family는 Mercury compounds(080)입니다.) 중요원소 : Cl family : Chlorine compounds(017) (중요원소 Cl을 충족하는 family는 Chlorine compounds(017)입니다.)
▼	▼
⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.	2개의 family/sub-family 명칭 Mercury compounds 및 Chlorine compounds를 조합하여 대체명칭을 작성하는 대신에 특정원소(Hg)의 family 명칭 Mercury compounds에 'inorganic'을 추가하여 작성한 대체명칭은 Inorganic mercury compound입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) (일부 금속과 같은 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.) 단, 수은(Hg)화합물은 대체자료기재제외물질에 해당되기 때문에 대체명칭을 작성할 수 없고, 원래명칭을 MSDS에 기재해야 합니다. ▶ Inorganic mercury compound ▶ Mercury chloride

예시 : CAS No. 543-80-6

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
① 신청물질명칭 선택	Acetic acid, barium salt

<p>CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>(=Barium acetate)</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) 원소 : Ba, O, C, H 모체 : ethane(acetic의 ethane), barium</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) 중요원소 : Ba 모체 : ethane(acetic의 ethane), barium</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) (분자 내 Acetic acid, salt는 IUPAC class 접미사(어) (carboxylic) acid와 모체 ethane으로 구성된 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Organic acids and derivatives(607)입니다. 이에 더해, 모체 ethane과 class 'salt'를 함께 충족하는 sub-family는 Salts of aliphatic acid입니다.) 중요원소 : Ba family : Barium compounds(056) (중요원소 Ba를 충족하는 family는 Barium compounds(056)입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>2개의 family/sub-family 명칭을 조합하는 대신에 특정원소 (Ba)의 family 명칭 Barium compounds에 'organic'을 추가하여 작성한 대체명칭은 Organic barium compound입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) (일부 금속과 같은 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.) 단, 바륨(Ba)가용성화합물은 대체자료기재제외물질에 해당되기 때문에 대체명칭을 작성할 수 없고, 원래명칭을 MSDS에 기재해야 합니다. ▶ Organic barium compound ▶ Acetic acid, barium salt</p>

예시 : CAS No. 109-95-5


대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Nitrous acid, ethyl ester (=Ethyl nitrite)</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : ester(nitrous acid 유도체) 원소 : O, N, C, H 모체 : Nitrous acid(nitrite)</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : - (Nitrous acid, ester(nitrite)는 noncarbon acid 유도체이므로 organic 화합물의 중요작용기를 적용하지 않고, 중요원소 N의 family를 적용합니다.) 중요원소 : N 모체 : Nitrous acid(nitrite)</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요원소 : N family : Nitrogen compounds(007) sub-family : Nitrites (분자 내 Nitrous acid, ester(nitrite)는 organic 화합물의 중요작용기가 아니기 때문에 중요원소 N의 family인 Nitrogen compounds(007)를 적용합니다. 이에 더해, IUPAC class 접미사(어) ester(acid derivatives)를 충족하는 sub-family는 Nitrites입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families)</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 Nitrites에 ethyl을 포괄하는 'organic'을 추가하여 작성한 대체명칭은 Organic nitrite입니다.</p>

명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.

(단일물질인 경우 s 삭제)

▶ Organic nitrite

예시 : CAS No. 7775-14-6

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Dithionous acid, sodium salt (=Sodium hydrosulphite)</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : salt(thionous acid 유도체) 원소 : S, O, Na, H 모체 : Dithionous acid, sodium salt</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : - (Dithionous acid는 noncarbon acid이므로 organic 화합물의 중요작용기를 적용하지 않고, 중요원소 S의 family를 적용합니다.) 중요원소 : S 모체 : Dithionous acid, sodium</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요원소 : S family : Sulphur compounds(016) (분자 내 Dithionous acid는 organic 화합물의 중요작용기가 아니기 때문에 중요원소 S의 family인 Sulphur compounds(016)를 적용합니다. 단, sub-family는 Dithionous acid에 해당하는 sub-family가 없어 적용하지 않습니다.)</p>

⑤ 대체명칭 작성

확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.

1개의 family/sub-family 명칭 Sulphur compounds에 Inorganic이 추가된 대체명칭은 Inorganic sulphur compound입니다.

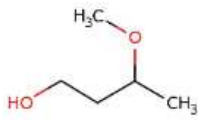
(단일물질인 경우 s 삭제)

(일부 금속과 같은 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.)

▶ Inorganic sulphur compound

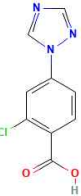
[물질 및 명칭별 Lexicon guide 적용 예시]

1. 탄소원자 사슬계물질의 모체 및 치환기

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>예시 : CAS No. 2517-43-3</p> <p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>3-methoxy-1-butanol</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : ol(alcohol), ether 원소 : O, C, H 모체 : butane</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기(class) : ol(alcohol), ether 중요원소 : - 모체 : butane</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : ol(alcohol), ether family : 603 Alcohols and derivatives sub-family : Glycoethers (분자 내 butanol은 IUPAC class 접미사(어) -ol과 모체 butane으로 구성된 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Alcohols and derivatives(603)입니다. 이에 더해, 분자 내 -ol(-O-H)과 oxy(-O-) 구조를 함께 충족하는 sub-family는 glycoethers입니다.) 중요원소 : -</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 glycoethers로 작성된 대체명칭은 glycoether입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) ▶ Glycoether</p>

2. 고리계(지방족 모체 및 치환기/방향족 모체 및 치환기) 화학물질

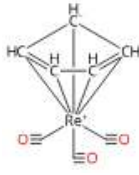
예시 : CAS No. 220141-15-1

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>2-Chloro-4-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-benzenecarboxylic acid</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : (carboxylic) acid, triazol 원소 : N, O, Cl, C, H 모체 : benzene</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : (carboxylic) acid, triazol 중요원소 : - 모체 : benzene</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601~650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : (carboxylic) acid family : Organic acids and derivatives(607) sub-family : Halogenated aromatic acids (분자 내 benzenecarboxylic acid는 IUPAC class 접미사(어) (carboxylic) acid와 모체 benzene으로 구성된 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Organic acids and derivatives(607)입니다. 이에 더해, 모체 benzene과 같은 aromatic(방향족) hydrocarbon과 chloro를 충족하는 sub-family는 Halogenated aromatic acids입니다.) 중요작용기 : triazol family : Heterocyclic bases and derivatives(613) sub-family : Triazole and derivatives (분자 내 triazol은 IUPAC class 접미사(어) Nitrogen compounds(heterocycles)인 organic 화합물이며, 헤테로(hetero)원자 N이 포함된 고리계(cycle) 화합물이기 때문에, 이를 충족하는 family는 Heterocyclic bases and derivatives(613)이고, sub-family는 Triazole and derivatives입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>2개의 family/sub-family 명칭 Halogenated aromatic acids 및 Triazole and derivatives를 조합하여 작성한 대체명칭은 Triazoleyl halogenated aromatic acid입니다.</p>

(단일물질인 경우 s 삭제)
(Triazole은 치환기이므로 접미사 -yl 추가)

▶ Triazoleyl halogenated aromatic acid

예시 : CAS No. 12079-73-1

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Tricarbonyl(η^5-2,4-cyclopentadien-1-yl)-Rhenium,</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : carbonyl, cyclopentadien 원소 : Re, C, O, H 모체 : cyclopentadien</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기(class) : cyclopentadien 중요원소 : Re(Rhenium) 모체 : cyclopentadien, Rhenium</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다.</p> <p>④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다.</p> <p>④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : cyclopentadien family : Hydrocarbons(601) sub-family : Alicyclic hydrocarbons (분자 내 cyclopentadien은 IUPAC class가 Carbon compounds(rings)인 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Hydrocarbons(601)이고, sub-family는 Alicyclic hydrocarbons입니다.)</p> <p>중요원소 : Re(Rhenium) family : Rhenium compounds(103) (중요원소 Re를 충족하는 family는 Rhenium compounds(103)입니다.)</p>

⑤ 대체명칭 작성

확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.

2개의 family/sub-family 명칭 Alicyclic hydrocarbons 및 Rhenium compounds를 조합하여 대체명칭을 작성하는 대신에 특정원소(Rh)의 family 명칭 Rhenium compounds에 'organic'을 추가하여 작성된 대체명칭은 Organic rhenium compound입니다.

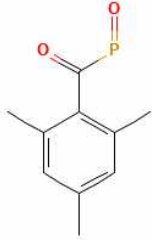
(단일물질인 경우 s 삭제)

(일부 금속과 같은 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.)

▶ Organic rhenium compound

3. “별첨”의 치환기

예시 : CAS No. 115877-96-8

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순위(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Phosphinyl(2,4,6-trimethylphenyl)methanone (Phosphine oxide, (2,4,6-trimethylbenzoyl)-) * 위의 2가지 명칭은 class 접미사(어) 명칭이 서로 다르며, IUPAC class 우선순위에 있어 Phosphorus compounds가 우선하기 때문에 아래 명칭을 선택할 수 있습니다. 다만, Lexicon guide에서는 Phosphine oxide에 해당하는 sub-families가 별도로 없기 때문에 위 명칭을 선택하여 대체명칭을 작성하였습니다.</p> 
▼	▼
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : Phosphinyl, one(=ketone) 원소 : P, C, O, H 모체 등 : methane</p>
▼	▼
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기(class) : one(=ketone) 중요원소 : P 모체 : methane</p>
▼	▼
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 ‘3. Division of substances into families and sub-families’ 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : one(=ketone) family : Ketones and derivatives(606) sub-family : Aromatic ketones (분자 내 methanone은 IUPAC class 접미사(어) one(=ketone)과 모체 methane으로 구성된 organic 화합물이므로, family는 Ketones and derivatives(606)입니다. 이에 더해, methanone과 직접 결합하고 있는 방향족 phenyl을 포괄하는 적합한 sub-family는 Aromatic ketones입니다.) 중요원소 : P family : Phosphorus compounds(015) (중요원소 P를 충족하는 family는 Phosphorus compounds(015)입니다.)</p>

▼	▼
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>2개의 family/sub-family 명칭 Aromatic ketones 및 Phosphorus compounds를 조합하여 작성한 대체명칭은 Phosphorus aromatic ketone입니다. (단일물질인 경우 s 삭제)</p> <p>▶ Phosphorus aromatic ketone</p>

4. 고분자화합물 또는 반응생성물

- ① 단량체 또는 반응물 명칭이 나열된 고분자화합물 명칭의 경우 중합(반응)된 결과물(주요 고분자화합물)의 명칭(들) 및 반복구조(들) 등의 자료를 별도로 제출해야 합니다. 만약, 해당 자료를 제출하지 못하는 경우 Lexicon guide를 적용한 대체명칭을 작성할 수 없고, 기존 총칭명 명명방법을 준용하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.
- ② 분자가 반복(poly)구조(mer)로 되어 있는 중합체 고분자화합물의 경우에는 ‘polymer’ 또는 접두사(어) ‘poly’를 추가하거나, resin에 해당하는 고분자화합물의 경우 접미사(어)에 ‘resin’을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다. 아울러, 미반응 단량체 또는 미반응 반응물의 함유량에 따라 고분자화합물 및 반응생성물이 대체자료기재제외물질에 해당하는 경우에는 대체명칭을 작성할 수 없습니다(비공개 승인 신청 반려 사유에 해당함).

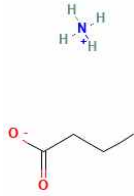
예시 : CAS No. 25085-50-1

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Formaldehyde, polymer with 4-(1,1-dimethylethyl)phenol poly[[[(1,1-dimethylethyl)hydroxyphenylene]methylene] (lexicon guide에 따른 대체명칭은 반응물이 아닌 결과물 구조를 통해 작성할 수 있기 때문에, 2번째 명칭 (poly~)과 같은 구조반복 단위(SRU; Structural Repeating Unit)명칭을 선택하여 대체명칭을 작성하였습니다.)</p>
▼	▼
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : hydroxyphenylene(phenol) 원소 : O, C, H 모체 등 : phenylene, methylene</p>
▼	▼
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기(class) : hydroxyphenylene(phenol) 중요원소 : - 모체 등 : phenylene, methylene</p>
▼	▼
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 ‘3. Division of substances into families and sub-families’ 목록에서 확인합니다.</p> <p>④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학</p>	<p>중요작용기 : phenol family : Phenols and derivatives(604) (분자 내 hydroxyphenylene은 hydroxy와 phenyl이 직접 결합하고 있는 phenol이므로 IUPAC class 접미사(어) phenol에 해당하는 organic 화합물이며, 이를 총괄하는 family는 Phenols and derivatives(604)입니다.) 중요원소 : -</p>

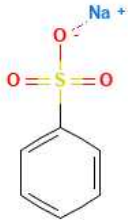
<p>원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다.</p> <p>④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	
<p style="text-align: center;">▼</p> <p>⑤ 대체명칭 작성</p> <p>확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p style="text-align: center;">▼</p> <p>1개의 family/sub-family 명칭 Phenol derivatives에 반복(poly)구조(mer)를 의미하는 'polymer' 또는 접두사(어) 'poly'를 추가하여 작성한 대체명칭은 Poly phenol derivatives입니다.</p> <p>▶ Polyphenol derivatives (결과물 고분자가 여러 물질인 경우 s는 삭제 안함).</p> <p>만약 결과물 구조가 resin에 해당하는 고분자화합물인 경우, family/sub-family 명칭 Phenol derivatives에 접미사(어)에 'resin'을 추가하여 작성한 대체명칭은 phenol derivatives resin입니다.</p> <p>▶ Phenol derivatives resin</p>

5. 염(salts)

예시 : CAS No. 14287-04-8

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Ammonium butanoate (Butanoic acid, ammonium salt)</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) 원소 : N, O, C, H 모체 : Ammonium, butane</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로젠원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) 중요원소 : N 모체 : Ammonium, butane</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601~650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) family : Organic acids and derivatives(607) sub-family : Salts of aliphatic acid (분자 내 butanoate는 IUPAC class 접미사(어) ~ate(acid 음이온)와 모체 butane으로 구성된 유기 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Organic acids and derivatives(607)이고, 모체 butane과 class 'salt'를 함께 충족하는 sub-family는 Salts of aliphatic acid입니다.)</p> <p>중요원소 : N family : Nitrogen compounds(007) (Ammonium은 IUPAC class 접미사(어) ~ium(양이온) 및 모체 ammonia으로 구성된 inorganic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Nitrogen compounds(007)입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>2개의 family/sub-family 명칭 Salts of aliphatic acid 및 Nitrogen compounds를 조합하여 작성한 대체명칭은 Salt of aliphatic acid and nitrogen compound입니다. (단일물질인 경우 s 삭제)</p> <p>▶ Salt of aliphatic acid and nitrogen compound</p>

예시 : CAS No. 515-42-4

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Benzenesulfonic acid, sodium salt</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : salt(sulfonic acid 유도체) 원소 : S, Na, O, C, H 모체 등 : Benzene, sodium</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : - (sulfonic acid는 noncarbon acid이므로 organic 화합물의 중요작용기 family를 적용하지 않고, 중요원소 S의 family를 적용합니다.) 중요원소 : S 모체 등 : Benzene, sodium</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601~650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요원소 : S family : Sulphur compounds(016) sub-family : Acid sulphur compounds (분자 내 sulfonic acid는 organic 화합물의 작용기가 아니기 때문에 중요원소 S의 family를 적용합니다. 이를 충족하는 family는 Sulphur compounds(016)이고, 이에 더해 class 접미사(어) sulfonic acid를 충족하는 sub-family는 Acid sulphur compounds입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 Acid sulphur compounds에 Benzene을 포괄하는 Organic을 추가하여 작성한 대체명칭은 Acid sulphur organic compound입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) (일부 금속과 같은 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.)</p>

▶ Acid sulphur organic compound

6. 서로 다른 사슬계화학물질, 고리계화학물질, 치환기
- 적용 안됨

7. 금속원소, 할로젠원소

가. 금속원소

① 신청물질에 금속원소가 있는 경우 적용합니다.

② 금속원소에 해당하는 families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.

②-1 대체자료기재제외물질 목록*에 있는 금속원소는 중요원소로 하고, 해당하는 families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.

* 고용노동부고시 「화학물질의 분류·표시 및 물질안전보건자료에 관한 기준」 제16조제1호~제5호

②-2 일부 금속 등 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.

나. 할로젠원소

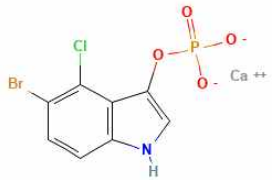
① 신청물질에 할로젠원소가 있는 경우 적용합니다.

② 할로젠원소에 해당하는 families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.

②-1 Inorganic 또는 Organic 화합물 중요원소의 경우 Fluorine compounds(009), Chlorine compounds(017), Bromine compounds(035), Iodine compounds(053), Astatine compounds(085) families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용시킬 수 있습니다.

②-2 Organic 화합물 중요작용기의 경우 Halogenated hydrocarbons(602), Phenols and derivatives(604), Organic acids and derivatives(607), Chlornitrated compounds(610) families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용시킬 수 있습니다.

예시 : CAS No. 125328-79-2

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>1-H-Indol-3-ol, 5-bromo-4-chloro-, dihydrogen phosphate (ester), calcium salt</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : salt 및 ester (phosphoric acid 유도체) 원소 : P, Ca, Cl, Br, O, N, 모체 : Indol-3-ol, phosphate(ester), calcium</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로젠원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : - (phosphate(phosphoric acid 유도체)는 noncarbon acid 유도체이므로 organic 화합물의 중요작용기 family를 적용하지 않고, 중요원소 P의 family를 적용합니다.) 중요원소 : P, Cl, Br 모체 : Indol-3-ol, calcium</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : - 중요원소 : P family : Phosphorus compounds(015) sub-family : Phosphates (분자 내 phosphate(ester)는 organic 화합물의 작용기가 아니기 때문에 중요원소 P의 family를 적용합니다. 이를 충족하는 family는 Phosphorus compounds(015)이고, 이에 더해 class 접미사(어) phosphate(ester)를 충족하는 sub-family는 Phosphoric esters이나, ester의 salt구조까지 반영한 sub-family는 Phosphates입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 Phosphates에 Cl, Br을 포괄하는 halogenated를 추가하고, 모체 Indol-3-ol을 포괄하는 organic을 추가하여 작성한 대체명칭은 Halogenated organic phosphate입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) (모체 및 치환기에 해당하는 구조는 그 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭을 작성할 수</p>


있습니다.)

▶ Halogenated organic phosphate

8. 금속, 비금속(C, N, O P, S) 및 할로젠원소를 제외한 원소

- ① 신청물질에 금속, 비금속(C, N, O P, S) 및 할로젠원소를 제외한 원소가 있는 경우 적용합니다.
- ② 원소에 해당하는 families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.
- ②-1 해당하는 families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.
- ②-2 일부 금속 등 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 ‘organic’ 또는 ‘inorganic’을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.

예시 : CAS No. 334869-71-5

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Neodymium(III)acetate hydrate</p> 
▼	▼
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) 원소 : Nd 모체 : Neodymium(III), ethane, hydrate</p>
▼	▼
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로젠원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) 중요원소 : Nd 모체 : Neodymium(III), ethane, hydrate</p>
▼	▼
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 ‘3. Division of substances into families and sub-families’ 목록에서 확인합니다.</p> <p>④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다.</p> <p>④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은</p>	<p>중요작용기 : salt(carboxylic acid 유도체) family : Organic acids and derivatives(607) sub-family : Salts of aliphatic acid (분자 내 acetate는 IUPAC class 접미사(어) carboxylic acid와 모체 ethane으로 구성된 organic 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Organic acids and derivatives(607)입니다. 이에 더해, class ‘salt’를 함께 충족하는 sub-family는 Salts of aliphatic acid입니다.) 중요원소 : Nd family : Neodymium compounds(060) (Neodymium을 포괄하는 family는 Neodymium compounds(060)입니다.)</p>

<p>작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>2개의 family/sub-family 명칭 Salts of aliphatic acid 및 Neodymium compounds를 조합하여 작성한 대체명칭은 Salts of aliphatic acid and neodymium compound입니다.</p> <p>▶ Salt of aliphatic acid and neodymium compound</p> <p>또는, 1개의 family/sub-family 명칭 Neodymium compounds에 acetate를 포괄하는 organic을 추가하여 작성한 대체명칭은 Organic neodymium compound입니다. (단일물질인 경우 s 삭제) (일부 금속과 같은 특정원소가 포함된 화합물의 경우 그 종류에 따라 'organic' 또는 'inorganic'을 추가하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.)</p> <p>▶ Organic neodymium compound</p>

9. 생물학적 추출물질의 원료 및 공정

- ① 신청물질의 명칭이 생물학적 원료 및 공정 명칭으로 구성되어 있는 경우 생물학적 원료 및 공정을 통해 나온 결과물질의 명칭(들) 및 분자구조(들) 등의 자료를 별도로 제출해야 합니다. 만약, 해당 자료를 제출하지 못하는 경우 Lexicon guide를 적용한 대체명칭을 작성할 수 없고, 기존 총칭명 명명방법을 준용하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.

예시 ; CAS No. 90294-88-5

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Oxidized logwood extract (명칭이 생물학적 원료 및 공정 명칭으로 구성되어 있는 경우에는 적용할 수 있는 families/sub-families가 없기 때문에 Lexicon guide 적용이 불가합니다.)</p>
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : - 원소 : - 모체 : -</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : - 중요원소 : - 모체 : -</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : - 중요원소 : -</p>

⑤ 대체명칭 작성

확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.

-

10. 화학적/광물 추출물질의 원료 및 공정

- ① 신청물질의 명칭이 화학적/광물 추출물질의 원료 및 공정 명칭으로 구성되어 있는 경우 화학적/광물 추출물질의 원료 및 공정을 통해 나온 결과물질의 명칭(들) 및 분자구조(들) 등의 자료를 별도로 제출해야 합니다. 만약, 해당 자료를 제출하지 못하는 경우 Lexicon guide를 적용한 대체명칭을 작성할 수 없고, 기존 총칭명 명명방법을 준용하여 대체명칭을 작성할 수 있습니다.

예시 : CAS No. 68603-09-8

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>Hydrocarbon waxes (petroleum), oxidized, calcium salts (명칭이 화학적/광물 추출물질의 원료 및 공정 명칭으로 구성되어 있는 경우에는 적용할 수 있는 families/sub-families가 없기 때문에 Lexicon guide 적용이 불가합니다.)</p>
▼	▼
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : - 원소 : - 모체 : -</p>
▼	▼
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : - 중요원소 : - 모체 : -</p>
▼	▼
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : - 중요원소 : -</p>

▼	▼
<p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	-

11. 효소(enzymes)

- ① 신청물질에 IUBMB Enzyme Nomenclature(<https://iubmb.qmul.ac.uk/enzyme/>)에 따라 명명된 효소가 있는 경우 적용합니다.
- ② 효소에 해당하는 families 명칭 Enzymes(647)를 대체명칭에 적용합니다.

IUBMB 명명법에서는 효소가 다음과 같이 7개 주요 그룹으로 분류되며, 각 그룹에 해당하는 개별 효소 명칭은 모두 Enzymes(647)를 대체명칭에 적용시킬 수 있다.

1. Oxidoreductases
2. Transferases
3. Hydrolases
4. Lyases
5. Isomerases
6. Ligases
7. Translocases

*예시: α -amylase(아밀라아제) 효소에 대한 IUBMB 명명법 및 대체명칭 작성 요령

1. google에서 “amylase”로 검색 후 EC(Enzymes Class) No. 3.2.1.1 확인
2. <https://iubmb.qmul.ac.uk/enzyme/> 접속
3. 내용 열람 및 효소 여부 확인
 IUBMB Enzyme Nomenclature
 EC 3.2.1.1
 EC 3(Hydrolase).
 3.2(Glycosylases).
 3.2.1(Glycosidases, i.e. enzymes hydrolysing O- and S-glycosyl compounds).
3.2.1.1(α -amylase)
4. 대체명칭은 Enzymes로 작성

예시 : CAS No. 9000-90-2

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.	α -amylase
▼	▼
② 신청물질명칭 중 효소명칭 구분 선택한 신청물질명칭에서 효소명칭을 구분하고, IUBMB(https://iubmb.qmul.ac.uk/enzyme/)를 통해 효소 여부를 확인합니다.	효소명칭 : α-Amylase IUBMB EC No. : 3.2.1.1 EC 3(Hydrolase) 3.2(Glycosylases) 3.2.1(Glycosidases, i.e. enzymes hydrolysing O- and S-glycosyl compounds) 3.2.1.1(α-amylase) (신청물질명칭 전체가 효소명칭에 해당합니다.)
▼	▼

<p>③ 효소에 해당하는 계열(families) 적용 효소에 해당하는 계열(families) 명칭을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다.</p>	<p>family : Enzymes(647)</p>
<p>▼</p> <p>④ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 명칭으로 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p>▼</p> <p>효소에 해당하는 대체명칭은 Enzyme입니다. (단일물질인 경우 s 삭제)</p> <p>▶ Enzyme</p>

12. 오일류 또는 유사 원료로부터 얻은 물질(petroleum, coke 및 coal 물질)

- ① 신청물질이 오일류 또는 유사 원료로부터 얻은 물질인 경우 적용합니다.
- ② 오일류 또는 유사 원료로부터 얻은 물질의 families는 Complex oil derivatives(649)이며, 해당하는 sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.
- ②-1 신청물질에 해당하는 sub-families는 다음과 같이 확인하고, 해당 sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.

1. www.concawe.eu/topics/reach에 접속, Inventory of Concawe Petroleum Substances 목록에서 신청물질에 해당하는 Category를 확인합니다.
2. Lexicon guide의 families/sub-families 목록에서 신청물질 Category와 일치(또는 해당)하는 sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.
 단. 해당 목록에서 CAS No가 8006-61-9(특수건강진단대상물질), 8032-32-4(관리대상유해물질), 8052-41-3(관리/작업환경측정/특수건강진단 대상물질) 물질에는 대체명칭을 적용시킬 수 없습니다. 그 외 Benzene(CAS No. 71-43-2) 및 1,3-Butadine(CAS No. 106-99-0)의 함유량이 $\geq 0.1\%$ (wt), Toluene(CAS No. 108-88-3)함유량이 $\geq 1\%$ (wt), n-Hexane(CAS No. 110-54-3)함유량이 $\geq 1\%$ (wt)인 물질에도 대체명칭을 적용할 수 없습니다. 단, 고도화된 정제 등을 통해 Benzene 등과 같은 Marker 물질*의 함유량이 한계농도 미만임이라는 사실을 신청인이 증명하는 경우(예시 ; MSDS 11번 항목에 관련내용 기재 등)에는 심사를 통해 대체 여부가 결정될 수 있습니다.
 * ECHA C&L Inventories에서 신청물질에 대한 검색결과, 'Note'에 기재된 CMR 분류 Marker물질이며, Benzene, 1,3-Butadine, Toluene, n-Hexane이 해당됩니다.

예시 : CAS No. 64742-54-7


대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.	Distillates (petroleum), hydrotreated heavy paraffinic
▼	▼
② 신청물질에 해당하는 Category 확인 www.concawe.eu/topics/reach 에 접속, Inventory of Concawe Petroleum Substances 목록에서 신청물질에 해당하는 Category를 확인합니다.	Category : LUBRICANT BASE OILS
▼	▼
③ 신청물질에 해당하는 families 및 sub-families 적용 Lexicon guide의 families/sub-families 목록에서 신청물질 Category와 일치(또는 해당)하는 sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.	family : Complex oil derivatives(649) sub-family : Base oil—unspecified (신청물질은 석유물질이므로, 이를 충족하는 family는 Complex oil derivatives(649)이고, 이에 더해

	Category 'LUBRICANT BASE OILS'를 충족하는 sub-family는 Base oil-unspecified입니다.)
<p style="text-align: center;">▼</p> <p>⑤ 대체명칭 작성 확인된 계열(families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.</p>	<p style="text-align: center;">▼</p> <p>1개의 family/sub-family 명칭 Base oil-unspecified를 적용하여 작성한 대체명칭은 Base oil-unspecified입니다.</p> <p>▶ Base oil-unspecified</p>

13. 입체화학 또는 이성질체 확인요소(예시; D(L)-, R(S)-, E(Z), cis(trans)-)가 포함된 물질

- ① 신청물질 명칭에 입체화학 또는 이성질체 확인요소가 있는 경우 적용할 수 있는 families/sub-families가 없기 때문에, 입체화학 또는 이성질체 확인요소를 제외한 나머지 명칭 또는 분자구조에 해당하는 families/sub-families 명칭을 대체명칭에 적용합니다.

예시 : CAS No. 51-35-4

대체명칭 작성 및 확인 절차	대체명칭 작성요령
<p>① 신청물질명칭 선택 CAS No.를 활용하여 CAS, ECHA, NCIS 등 화학물질검색사이트에서 검색되는 명칭에서 작용기 우선순서(order of precedence of chemical functional group)가 적용된 명칭(대체로 첫 번째로 검색되는 명칭)을 선택합니다. 이때, 물질식별이 곤란한 관용명이나 상품명 등은 제외합니다.</p>	<p>trans-(2S,4R)-4-Hydroxy-L-proline (2S,4R)-4-Hydroxypyrrolidine-2-carboxylic acid</p> 
<p>② 신청물질의 작용기 및 원소 확인 신청물질에 있는 모든 작용기 및 원소를 확인합니다.</p>	<p>작용기 : (carboxylic) acid, hydroxy 원소 : N, O 모체 : pyrrolidine</p>
<p>③ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소 결정 신청물질의 주요 특성을 식별하는데 중요한 작용기 및 원소를 결정합니다. class 접미사(어)에 해당하는 작용기 및 원소는 중요작용기 및 중요원소로 결정합니다. 이 외에도 분자 내 자기반응성/폭발성 등의 작용기 또는 할로겐원소가 있는 경우 중요작용기 또는 중요원소에 포함시킵니다. 무기(inorganic)물질의 경우에는 중요원소를 결정하고, 유기(organic)물질의 경우에는 중요작용기 및 중요원소(있는 경우에 한함)를 결정합니다.</p>	<p>중요작용기 : (carboxylic) acid 중요원소 : - 모체 : pyrrolidine</p>
<p>④ 신청물질의 중요작용기 및 중요원소에 해당하는 families 및 sub-families 적용 중요작용기 및 중요원소를 가장 정확하게 포괄하는 계열(families) 및 하위계열(sub-families)을 Lexicon guide의 '3. Division of substances into families and sub-families' 목록에서 확인합니다. ④-1 물질의 주요 특성이 원소를 통해 식별될 수 있는 무기(inorganic) 또는 유기(organic)물질은 화학원소 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (001~103)명칭을 확인합니다. ④-2 물질의 주요 특성이 작용기(functional group)를 통해 식별될 수 있는 유기(organic)물질은 작용기 명칭으로부터 파생된 families/sub-families (601-650)명칭을 확인합니다.</p>	<p>중요작용기 : carboxylic acid family : Organic acids and derivatives(607) sub-family : Alicyclic acids (분자 내 proline은 IUPAC class 접미사(어) (carboxylic) acid와 모체 pyrrolidine으로 구성된 유기 화합물이므로, 이를 충족하는 family는 Organic acids and derivatives(607)입니다. 이에 더해, 모체 pyrrolidine을 함께 충족하는 sub-family는 Alicyclic acids입니다.)</p>
<p>⑤ 대체명칭 작성</p>	<p>1개의 family/sub-family 명칭 Alicyclic acids를 적</p>

확인된 계열(families) 및 하위계열(sub-families) 명칭을 적용 또는 조합하여 대체명칭을 작성합니다.

용하여 작성한 대체명칭은 Alicyclic acid입니다.
(단일물질인 경우 s 삭제)

▶ Alicyclic acid

S- II -3. 대체함유량 작성 및 확인

신청물질함유량/대체함유량은 다음 순서와 같이 작성/확인합니다.

S- II -3. S. 신청물질함유량/대체함유량 확인 절차

S- II -3. S1. 신청물질함유량 구분

S- II -3. S2. 대체함유량 작성

S- II -3. S3. 신청물질함유량/대체함유량 적합성 검토

S- II -3. S-1. 신청물질함유량 구분

신청물질함유량을 대체함유량기준별로 2가지로 구분합니다.

① 신청물질함유량을 대체함유량기준별로 다음과 같이 2가지로 구분합니다.

- 신청물질의 함유량이 25퍼센트(%) 미만인 경우
- 신청물질의 함유량이 25퍼센트(%) 이상인 경우

S- II -3. S2. 대체함유량 작성

구분된 신청물질함유량에 따라 대체함유량을 작성합니다.

① 구분된 신청물질함유량에 대체함유량기준을 적용하여 따라 대체함유량을 작성합니다.

- 신청물질의 함유량이 25퍼센트(%) 미만인 경우 ± 10 퍼센트(%) 내에서 범위로 작성할 수 있습니다.
- 신청물질의 함유량이 25퍼센트(%) 이상인 경우 ± 20 퍼센트(%) 내에서 범위로 작성할 수 있습니다.

(S- II -3. S3. 신청물질함유량/대체함유량 적합성 검토)

공단에서는 대체자료 적합성 심사 시 신청물질함유량 대비 대체함유량의 적합성을 검토합니다.

① 신청물질함유량 대비 대체함유량이 대체함유량기준에 따라 적정한지 검토합니다.

- 신청물질의 함유량이 25퍼센트(%) 미만인 경우 ± 10 퍼센트(%) 내에서 범위로 작성할 수 있습니다.
- 신청물질의 함유량이 25퍼센트(%) 이상인 경우 ± 20 퍼센트(%) 내에서 범위로 작성할 수 있습니다.

② 대체함유량이 적합하지 않은 경우 공단의 대체자료 심사 절차에 따라 ‘서류보완사항 기재서’를 작성하여 보완기간(최초 10일)과 함께 신청인에게 보완을 요청할 수 있습니다(보완기간은 심사기간에 산입되지 않습니다.)

예시

신청물질함유량		대체함유량	대체기준 적용항목
① 실제함유량이 단일값이며, 신청서에 단일값으로 기재한 경우	20%	<p>20±10%의 범위(10~30%) 내 모두 가능</p> <p>① 10~30% (적합) ② 15~30% (적합) ③ 10~20% (적합) ④ 20~40% (부적합) * 상한값 40%가 범위에서 벗어남</p>	고용노동부고시 제2023-9호 제17조 제5항 제1호
	30%	<p>30±20%의 범위(10~50%) 내 모두 가능</p> <p>① 10~50% (적합) ② 20~50% (적합) ③ 10~40% (적합) ④ 1~40% (부적합) * 하한값 1%가 범위에서 벗어남</p>	고용노동부고시 제2023-9호 제17조 제5항 제2호
② 실제함유량이 단일값이며, 신청서에 범위로 기재한 경우	20~30%	<p>20(하한값)±10%~30(상한값)±10%의 중복범위(20~30%) 내 모두 가능</p> <p>① 20~30% (적합) ② 25~30% (적합) ③ 10~30% (부적합) * 하한값 10%가 중복범위에서 벗어남</p>	고용노동부고시 제2023-9호 제17조 제5항 제1호
		<p>중복범위(20~30%)를 벗어난 경우 원래 함유량이 25% 이상/미만에 따라 다음과 같이 가능</p> <p>① 25% 미만인 경우 : 위와 동일 ② 25% 이상인 경우 : 20(하한값)±20%~30(상한값)±20% 중복범위(10~40%) 내 모두 가능</p> <p>②-1 10~40% (적합) ②-2 20~30% (적합) ②-3 10~50% (부적합) * 상한값 50%가 중복범위에서 벗어남</p>	
	30~40%	<p>30(하한값)±20%~40(상한값)±20%의 중복범위(20~50%) 내 모두 가능</p> <p>① 20~50% (적합) ② 20~40% (적합) ③ 10~40% (부적합) * 하한값 10%가 중복범위에서 벗어남</p>	고용노동부고시 제2023-9호 제17조 제5항 제2호

예시

신청물질함유량	대체함유량	대체기준 적용항목
③ 실제 함유량들이 범위 내 모두 존재하며, 신청서에 범위로 기재한 경우 (예시 : 대표 MSDS 등)	20~30%	20(하한값)~30(상한값) 중 선택된 단일값으로부터 ±10%범위 가능 ① 10~30% (적합) ② 15~35% (적합) ③ 20~40% (적합) ④ 10~25%(부적합) * <20% 범위의 경우 상한값 (30%)의 -10%범위를 벗어남 ⑤ 25%~40%(부적합) * >30% 범위의 경우 하한값 (20%)의 +10%범위를 벗어남
	30~40%	20(하한값)~30(상한값) 중 선택된 단일값으로부터 ±20%범위 가능 ① 10~50% (적합) ② 15~55% (적합) ③ 20~60% (적합) ④ 10~35%(부적합) * <20% 범위의 경우 상한값 (40%)의 -20%범위를 벗어남 ⑤ 35%~60%(부적합) * >50% 범위의 경우 하한값 (30%)의 +20%범위를 벗어남

첨부자료

I. IUPAC 유기화합물 명명법(출처 ; 대한화학회)

1. 물질의 부류(class)를 정한다. 여러 부류가 있는 경우 우선순위가 높은 부류를 선정한다. 일반적으로 산화상태가 높은 탄소를 가지는 작용기가 낮은 산화상태를 가지는 작용기 보다 우선순위가 높다.

라디칼 > 음이온 > 양이온 > 양쪽성이온 > 카르복시산 > 카르복시산 유도체 (산무수물, 에스테르, 카르복시산 할라이드, 아마이드) > 나이트릴 > 알데히드 > 케톤 > 알코올 > 하이드로과산화물 > 아민 > 에테르

2. 모체 구조를 정하고, 존재하는 구조적 혹은 명명법적 요소를 정의한다. 작용기가 없는 경우에는 Heteromono(poly)cycle > Carbomono(poly)cycle > Alkane(Alkene, Alkyne) 등으로 순위가 정해져 있고, 큰 고리와 긴 사슬이 작은 고리와 짧은 사슬보다 우선순위가 높다.

3. 어떤 유형의 명명법을 사용할 것인지를 정한다. (보기: 치환, 접속, 첨가, 삭제, 작용기-분류 명명법 등) 가장 선호하는 명명법은 치환명명법이며, 때로는 CAS 명명법이 선호되기도 한다. 구조적 혹은 명명법적 요소를 각각 개별적으로 명명한 다음 위치 표시자(locant) (숫자 혹은 문자)와 구두점을 첨가한다. 위치표시자는 번호매기기 규약을 따른다. 위치 표시자는 아라비아숫자, 그리스어 (.....등.....로마자의 이탤릭 대문자로 사용하는 원소기호 및 IUPAC에서는 권장하지 않는 m-, p- 가 있다. 동일한 구조적 특성에 관한 위치표시자의 순서는 로마자, 그리스어, 숫자가 된다(예시; N, P, S, 2). 모체 구조 작용기의 위치 번호는 어미 바로 앞에 쓰고, 번호는 될 수 있는 한 낮게 한다. 그 다음 치환기의 위치 번호를 낮게 배정한다.

4. 치환기 접두사(어), 삽입사, 접미사(어)를 규정에 따라 배열하고 적절한 위치표시자와 함께 모체구조 이름에 삽입한다. 같은 종류의 치환기의 위치번호는 쉼표로 표시하고 모든 위치 표시자는 하이픈으로 분리한다. 모든 접두사(어)는 알파벳 순서로 배열한다. 전체 이름은 다음 순서가 된다.

접두사(어) > 모체(parent) 이름 혹은 모체 치환기 이름 > 어미(ending) (접미사(어), 작용기성-모체 이름 혹은 부류 이름)

5. 필요에 따라서 동위원소, 입체화학 표시자를 첨부한다.

- 특별한 구조의 위치를 표시하기 위해서 사용하는 숫자 또는 문자로 된 위치 표시자(locant)는 명칭에서 관련된 부분 바로 앞에 쓰고 하이픈으로 연결한다. 혼동 가능성이 없는 분명한 경우에는 생략할 수도 있지만 항상 위치번호를 포함하는 것이 좋다.

보기: 헥스-2-엔 (hex-2-ene) (이전 명칭 (1973년 명칭)은 2-hexene), 사이클로헥스-2-엔-1-올 (cyclohex-2-1-ol) (이전 명칭 2-cyclohexen-1-ol)

- 쉼표, 마침표, 하이픈, 간격(space) 콜론과 세미콜론의 구두점을 사용하여 화학명의 모호함을 제거한다.

* 쉼표 : 여러 개의 위치번호를 표시하기 위하여 혹은 접합고리에서는 접합위치의 문자를 분리하기 위하여 사용함(예시; 1,2-다이클로로에테인, 다이벤조[a,j]안트라센)

* 마침표 : 고리크기를 분리하기 위하여 사용함(예시; 바이사이클로[3.2.1]옥테인)

* 하이픈 : 화합물의 이름에서 위치 번호나 입체화학 표기는 하이픈 '-'으로 연결함(예시; (E)-뷰트-2-엔)

* 간격(space) : 산과 염. 에스터, 산무수물, 카보닐 화합물과 케톤, 아세탈, 하이드라존 또는 옥심과 같은 유도체 할로겐과 유사 할로겐 화합물, 알코올, 에테르, 과산화물과 같은 산소 화합물과 칼코젠 유사체의 경우에는 간격을 표시하기 위하여 빈 칸을 사용한다. 산 이름은 우리 말에서는 붙여 쓰지만 영어에서는 띄어 쓴다(예시; 아세트산 (acetic acid), 아세트산 에틸 (ethyl acetate), 에틸 메틸 케톤 (ethyl methyl ketone), 염화 아세틸 (acetyl chloride), 에틸 알코올 (ethyl alcohol), 황화 메틸 프로필 (methyl propyl sulfide).

* 수 접두사(어)(numerical prefix 혹은 배수 접두사(어), multiplicative prefix) : 화학식에 동일한 원자 또는 원자단이 하나 이상 있는 경우에는 수 접두사(어)를 사용한다. 원자나 원자단의 이름이 우리말로 시작되는 경우에는 ‘일-’, ‘이-’, ‘삼-’ 등의 수 접두사(어)를 사용하고, 그렇지 않을 경우에는 그리스어와 라틴어에서 유래된 표 3-2 의 수 접두사(어)를 사용한다. 원자단의 이름이 복잡할 경우에는 괄호 앞에 ‘비스-’, ‘트리스-’, ‘테트라키스-’ 등의 배수접두사(어)를 사용한다.

* 괄호: 화합물 구조의 특징 부분을 명확히 알리기 위하여 소괄호(parenthesis), 중괄호 (brace), 대괄호(bracket)를 사용한다. 복합 사용 순서는 소괄호, 대괄호, 중괄호가 된다. {{()}}

* 소괄호: 치환기, 첨가된 수소, E/Z, R/S 등의 입체화학 지정 용어 및 동위원소가 치환된 화합물을 나타내는 데 사용한다.

* 대괄호: 접합고리 화합물에서는 접합위치, 여러고리 화합물과 스파이로 화합물에서 고리크기를 표시하기 위하여 사용한다. 또한 다리에 포함된 이중결합이나 접합고리계에서의 성분고리의 헤테로원자 같은 성분 구조 특성에 필요한 위치자를 표시하는 데 사용한다(예시; 다이벤조[b,e]옥세핀 (dibenzo[b,e]oxepine), 바이사이클로[3.2.1]옥테인 (bicyclo[3.2.1]octane), 다이스파이로 [5.1.7.2]헵타데케인(dispiro[5.1.7.2]heptadecane), 4,4’-{1-[(5-[(4’-사이아노바이페닐-4-일)옥시]펜틸)옥시]카보닐}에테인-1,2-다일}다이벤조산 (4,4’-{1-[(5-[(4’-cyanobiphenyl-4-yl)oxy]pentyl)oxy]carbonyl}ethane-1,2-diyl}dibenzoic acid), 4a,9a-뷰트 [2]에노안트라센 (4a,9a-but[2]enoanthracene), 4H-[1,3]옥사싸이올로[5,4-b]피롤 (4H-[1,3]oxathiolo[5,4-b]pyrrole).

* 이탤릭체 : 이탤릭체는 알파벳에 속하지 않는 문자를 표시하기 위하여 주로 사용한다. 이탤릭 소문자는 접합고리계 화합물명에서 접합 위치를 표시하거나 이치환벤젠 유도체에서는 o, m, p를 1,2 (ortho), 1,3(meta), 1,4(para) 대신 사용할 수 있지만 숫자 사용이 우선이다. O-, N-, P-, S- 같은 헤테로원자에 대한 결합을 표시하는 것과 tert-, cis-, trans-, E/Z, R/S 등은 이탤릭체를 사용한다. n-(normal, 곁가지가 없다는 의미)는 IUPAC에서는 사용하지 않는다. 따라서 IUPAC명명법에서는 n-펜테인은 사용하지 않는 이름이다. 유의할 점은 접두사(어) 아이소 iso 는 이탤릭체가 아니고 모체와 분리하여 사용하지 않는다.

II. IUPAC 명명법에 따른 SENIORITY ORDER FOR CLASSES

(출처 ; IUPAC organic bluebook 2013)

P-41 SENIORITY ORDER FOR CLASSES

The order of seniority of classes is given in Table 4.1. It ranks classes expressed by suffixes (classes 1 through 20) and classes based on the senior atom in compounds (classes 21 through 43). *

Table 4.1 General compound classes listed in decreasing order of seniority

1 Radicals

2 Radical anions

3 Radical cations

4 Anions

5 Zwitterions

6 Cations

7 Acids

7a 'Suffix' acids in the order carboxylic (not including carbonic or polycarbonic acids, which belong to sub-class '7b'), sulfonic, sulfinic, selenonic, seleninic, telluronic, tellurinic, each followed in turn by the corresponding peroxy, imidic, and hydrazonic acids. Chalcogen analogues follow each of the corresponding oxygen acids and, in each case, the chalcogen analogue with the greater number of the preferred chalcogen atom ($O > S > Se > Te$), considered first in .OOH groups, then in .OH groups as necessary. (See P-42 for the complete list of seniority of acids, P-43 for suffixes modified by functional replacement, and Table 4.4 for an extensive list of the order of seniority of all these suffixes.)

7b Carbon acids with no substitutable hydrogen atoms in the order polynuclear carbonic acids (tricarboxylic acid, dicarboxylic acid), then carbonic acid, and cyanic acid.

7c Oxoacids having substitutable hydrogen atoms attached to their central atoms and their acidic derivatives in the following decreasing order of seniority: azonic, azinic, phosphonic, phosphinic, phosphonous, phosphinous acids, etc. (see P-42 for the complete list).

7d Mononuclear and polynuclear oxoacids other than carbon acids without substitutable hydrogen atoms attached to their central atom (see 7b, above), but which may be functionalized or may form derivatives by functional replacement, which have substitutable hydrogen atoms.

7e Other monobasic 'oxoacids' used as functional parent compounds.

8 Anhydrides [substitutive nomenclature is used for cyclic anhydrides that are named as heterocycles (see 16 below); functional class names are given to acyclic anhydrides and to a few cyclic anhydrides corresponding to acids having retained names; cyclic anhydrides are preferred over noncyclic anhydrides, when functional names are

used].

9 Esters (functional class names are given to noncyclic esters; lactones and other cyclic esters are named as heterocycles; see 16 below).

10 Acid halides and pseudohalides [first in the order of the corresponding acid given above, then in the order of the halogen atoms (.F > .Cl > .Br > .I); then in the following order of pseudohalogen groups (.N3 > .CN > .NC > .NCO > .NCS > .NCSe > .NCTe > .CNO).

11 Amides [in the order of the corresponding acids; cyclic amides are named as heterocycles (see class 16 below)].

12 Hydrazides (in the order of the corresponding acids).

13 Imides (includes only cyclic imides derived from organic di- or polybasic acids having retained names).

14 Nitriles.

15 Aldehydes and chalcogen analogues.

16 Ketones (of the type .C-CO-C.), pseudoketones (of the type .C-CO-X , X-CO-X, or .CO-X-CO., where X \neq C, halogen, pseudohalogen, or NH₂, see P-64.1.2) and heterones (see P-64.4). See Classes 8, 9, 11 and 13, on lactones, lactams, anhydrides, imides.

17 Hydroxy compounds and chalcogen analogues (includes alcohols and phenols, which no longer have a separate ranking order).

18 Hydroperoxides (peroxols), i.e., .OOH.

19 Amines (defined as having three single covalent attachments to a nitrogen atom, i.e., NR₃).

20 Imines, R=NH or R=N-R'. Classes denoted by the senior atom in heterane nomenclature

21 Nitrogen compounds: heterocycles, polyazanes, hydrazines (except for hydrazides), diazenes, hydroxylamines, azanes (except for amides, amines, and imines)

22 Phosphorus compounds: heterocycles, polyphosphanes, phosphanes

23 Arsenic compounds: heterocycles, polyarsanes, arsanes

24 Antimony compounds: heterocycles, polystibanes, stibanes

25 Bismuth compounds: heterocycles, polybismuthanes, bismuthanes

26 Silicon compounds: heterocycles, polysilanes, silanes

27 Germanium compounds: heterocycles, polygermanes, germanes

28 Tin compounds: heterocycles, polystannanes, stannanes

29 Lead compounds: heterocycles, polyplumbanes, plumbanes

30 Boron compounds: heterocycles, polyboranes, boranes

31 Aluminium compounds: heterocycles, polyalumanes, alumanes

32 Gallium compounds: heterocycles, polygallanes, gallanes

33 Indium compounds: heterocycles, polyindiganes, indiganes

34 Thallium compounds: heterocycles, polythallanes, thallanes

35 Oxygen compounds: heterocycles, polyoxidanes (trioxidane but not peroxides or ethers)

36 Sulfur compounds: heterocycles, polysulfanes (trisulfane, λ_6 and λ_4 mono and disulfanes, but not disulfides or sulfides)

37 Selenium compounds: heterocycles, polyselanes (triselane but not diselenides, selenides)

38 Tellurium compounds: heterocycles, polytellanes (tritellane but not ditellurides, tellurides)

39 λ_7 , λ_5 and λ_3 halogen compounds in the order $F > Cl > Br > I$.

40 Carbon compounds: rings, chains

41 **Ethers**, then sulfides, sulfoxides, sulfones; then selenides, selenoxides, etc.

42 Peroxides, then chalcogen analogues with the greater number of the senior chalcogen atom, where $O > S > Se > Te$.

43 λ_1 Halogen compounds in the order $F > Cl > Br > I$

* In this table, the symbol ' $>$ ' means 'is senior to'.

III. Order of precedence of compound classes

(출처 ; Naming and Indexing of Chemical Substances for Chemical Abstracts 2007 Edition)

106. Order of precedence of compound classes

- (a) Free radicals
- (b) Cationic compounds: coordination cations, onium, aminium, ylium cations
- (c) Neutral coordination compounds, including metallocenes
- (d) Anionic compounds, e.g., Borate(1-)
- (e) Acids
- (f) Acid halides, fluoride, chloride, bromide, iodide, azide, isocyanate, isothiocyanate, isocyanide, cyanide (for non-carbon acid residues only)
- (g) Amides
- (h) Nitriles
- (i) Aldehydes, Thiols, Selenals, Tellurals
- (j) Ketones, Thiones, Selones, Tellones
- (k) Alcohols, Phenols, Thiols, Selenols, Tellurols
- (l) Hydroperoxides
- (m) Amines
- (n) Imines
- (o) Nitrogen compounds: heterocyclic: acyclic e.g., Triazane, Diazene, Hydrazine, Hydroxylamine, Thiohydroxylamine
- (p) Phosphorus compounds: heterocyclic, acyclic e.g., Diphosphine, Phosphine oxide, Phosphine sulfide, Phosphine imide, Phosphorane, Phosphine
- (q) Arsenic compounds
- (r) Antimony compounds
- (s) Bismuth compounds
- (t) Boron compounds: carbapolyboranes, hetero polyboranes, polyboranes, heterocyclic, Borane
- (u) Silicon compounds: heterocyclic, acyclic, e.g., Disiloxane, Disilathiane, Trisilane, Disilane
- (v) Germanium compounds
- (w) Tin compounds
- (x) Lead compounds
- (y) Oxygen compounds: heterocyclic: acyclic polyoxides, e.g., Trioxide, Peroxide
- (z) Sulfur compounds: heterocyclic: acyclic polysulfides and their oxides, e.g., Trisulfone, Trisulfide, Disulfone, Disulfoxide, Disulfide
- (aa) Selenium and tellurium compounds
- (bb) Carbon compounds: carbocyclic
- (cc) Silane
- (dd) Carbon compounds: acyclic

IV. Main Chemical Class and Sub-groups in Color Index

분자구조를 확인할 수 없는 color index로 표기물질(안료 등)의 경우 자기반응성 및 폭발성 원자단이 포함되어 있는지 확인할 수 있습니다.

CICNs	Main Chemical Class	Sub-groups
10000-10299	Nitroso	
10300-10999	Nitro	
11000-19999	Monoazo	
20000-20999	Disazo	Synthetic type I
21000-25999	Disazo	Synthetic type II
26000-28999	Disazo	Synthetic type III
29000-29999	Disazo	Synthetic type IV
30000-31499	Trisazo	Synthetic type I
31500-33499	Trisazo	Synthetic type II
33500-33999	Trisazo	Synthetic type III
34000-34899	Trisazo	Synthetic type IV
34900-34999	Trisazo	Synthetic type V
35000-35999	Tetrakisazo	
36000-36999	Polyazo	
37000-39999	Azoic	
40000-40599	Stilbene	5 types
40600-40799	Stilbene	Fluorescent brighteners
40800-40999	Carotenoid	
41000-41999	Diphenylmethane	
42000-42499	Triarylmethane	Diamino
42500-43499	Triarylmethane	Triamino
43500-43799	Triarylmethane	Aminohydroxy
43800-43999	Triarylmethane	Hydroxy
44000-44499	Triarylmethane	Naphthyl
44500-44999	Triarylmethane	Miscellaneous
45000-45299	Xanthene	Fluorenes (5 types)
45300-45349	Xanthene	Rhodols
45350-45549	Xanthene	Fluorones (2 types)
45550-45999	Xanthene	Miscellaneous
46000-46999	Acridine	
47000-47999	Quinoline	
48000-48999	Methine and Polymethine	
49000-49399	Thiazole	
49400-49699	Indamine	
49700-49999	Indophenol	
50000-50029	Azine	Quinoxalines

50030-50049	Azine	Eurhodines
50050-50199	Azine	Aposafranines (4 types)
50200-50399	Azine	Safranines (3 types)
50400-50499	Azine	Indulines and Nigrosines
50500-50999	Azaheterocyclic	Pyrazolines and fused ring systems
51000-51299	Oxazine	Oxazines
51300-51399	Oxazine	Dioxazines
51400-51499	Oxazine	Oxazones
51500-51999	Benzoxazole	
52000-52999	Thiazine	
53000-54999	Sulfur	7 sections
55000-55999	Lactone	
56000-56099	Aminoketone and Hydroxyketone	Arylaminoquinones
56100-56149	Aminoketone and Hydroxyketone	Diketopyrrolopyrroles
56150-56189	Aminoketone and Hydroxyketone	Isoindolines and Acridones
56190-56999	Aminoketone and Hydroxyketone	Naphthalimides
57000-57999	Aminoketone and Hydroxyketone	Hydroxyketones
58000-58899	Anthraquinone	Hydroxy
58900-60499	Anthraquinone	Polycyclic analogues
60500-60999	Anthraquinone	Amino and Aminohydroxy
61000-64999	Anthraquinone	Polyamino
65000-66699	Anthraquinone	Dianthrimides and Amides
66700-72999	Anthraquinone	Heterocyclic analogues
73000-73299	Indigoid	Indigo and homologues
73300-73594	Indigoid	Thioindigo and homologues
73595-73799	Indigoid	Hybrids
73800-73899	Indigoid	Miscellaneous
73900-73999	Quinacridone	
74000-74999	Phthalocyanine	
75000-75999	Natural	
76000-76999	Oxidation Bases	
77000-77999	Inorganic	

S. A. 별첨 부록

1. 오일류 또는 유사 원료로부터 얻은 물질(petroleum 물질) 목록

참고 문헌

1. Part B of Annex VI to Regulation (EC) No 1272/2008 「Lexicon guide for establishing the alternative designations (generic names)」
2. 고용노동부고시 제2023-9호 「화학물질의 분류·표시 및 물질안전보건자료에 관한 기준」
3. Nomenclature of Organic Chemistry. IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013
4. Nomenclature of Inorganic Chemistry. IUPAC Recommendations 2005
5. Naming and Indexing of Chemical Substances for Chemical Abstracts 2007 Edition