

少量新規化学物質の申出における 構造式ファイルの作成について

平成30年秋

独立行政法人製品評価技術基盤機構
(NITE)

1. 構造式ファイルの作成について

- 平成31年度からの少量新規化学物質の申出には電子データ(MOLファイル形式)の提出が必要となります。

※本講演資料における「構造式ファイル」は、MOLファイルのことを指しています。

・経済産業省推奨 構造式描画ソフトウェア

以下のソフトウェアを用いて、MOLファイルを作成するようにしてください。

種類	ソフト名称	対応OS	対応言語	マニュアル	開発元
有償ソフト	ChemDraw	Windows、 Mac OS	英語	あり(日本語)	PerkinElmer (CambridgeSoft)
フリーソフト	Marvin JS	Windows、 Mac OS	英語	あり(日本語)	Chemaxon
	BIOVIA Draw	Windows	英語	あり(日本語)	Dassault Systems Biovia

なお、本講演会で説明するMOLファイル作成方法は、
使用するソフトウェアにかかわらず共通の内容です。

1. 構造式ファイルの作成について

■ 「NITE MOLファイル作成システム」

9月からNITEのHPで

Marvin JSを用いた構造式描画ツールを提供

<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/syouryou/mol/>

MOLファイル作成システムの特徴

- ・ブラウザ上で作動
- ・ワンクリックでMOLファイルの出力
- ・ガイダンスやFAQを掲載
- ・他形式の構造式ファイルの取込可

The screenshot displays the NITE MOL file creation system interface. The page title is '化学物質管理' (Chemical Substance Management). The main content area shows a chemical structure editor with a benzene ring containing a hydroxyl group (HO) and a methyl group (CH3). The interface includes a navigation bar with 'MOLファイル出力' (MOL File Output) selected, and a footer with 'MOLファイル作成に関する問い合わせ先' (Contact information for MOL file creation).

1. 構造式ファイルの作成について

- MOLファイルの描画方法について、ガイダンスとFAQが公開されています。

構造式ファイル作成ガイダンス/FAQ

■ 少量新規化学物質の構造式ファイル作成に係る事業者ガイダンス(経済産業省ページ)

http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/shinki/kouzoushikisakuseiguidever1.1.pdf

■ 少量新規化学物質の構造式ファイル作成に係るFAQ (NITEページ)

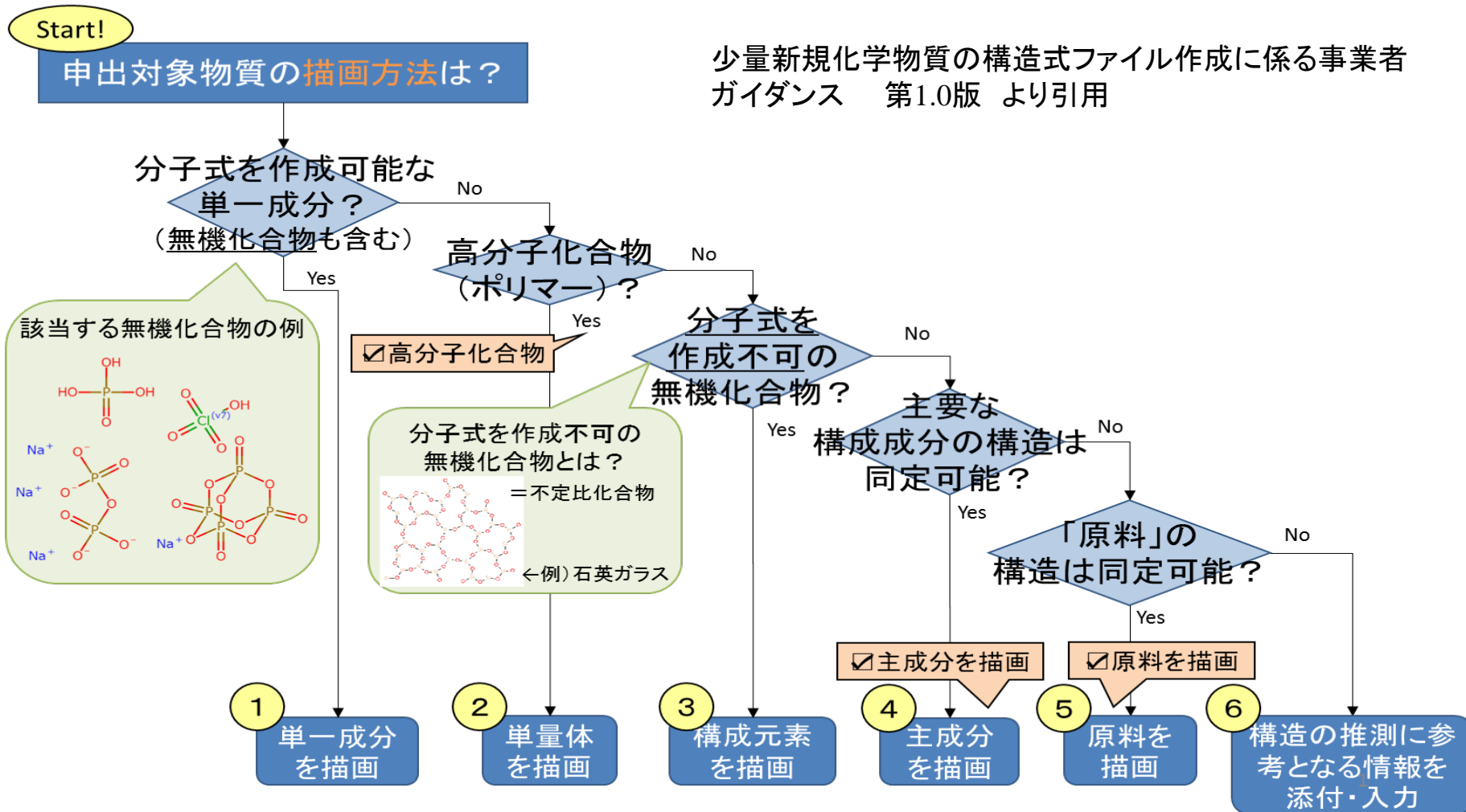
<https://www.nite.go.jp/data/000094187.pdf>

2. 構造情報を作成する対象の選択

- ① 単一成分
- ② 高分子化合物
- ③ 分子式を作成不可の無機化合物
- ④ 主成分
- ⑤ 原料

2. 構造情報を作成する対象の選択

少量新規化学物質の構造式ファイル作成に係る事業者
ガイダンス 第1.0版 より引用



2. 構造情報を作成する対象の選択

申請の際には、作成したMOLファイルが以下の特徴に該当するかどうかのチェックが必要です。

「高分子化合物の記載」

判断基準：高分子化合物の定義(ガイダンスp.2参照。繰り返し単位を持つ、平均分子量が1,000以上など。)を満たす場合は、「有」に☑

「主成分を記載」

判断基準：個別成分の含有率が不明などで、主成分を描画した構造が含まれている場合は、「有」に☑

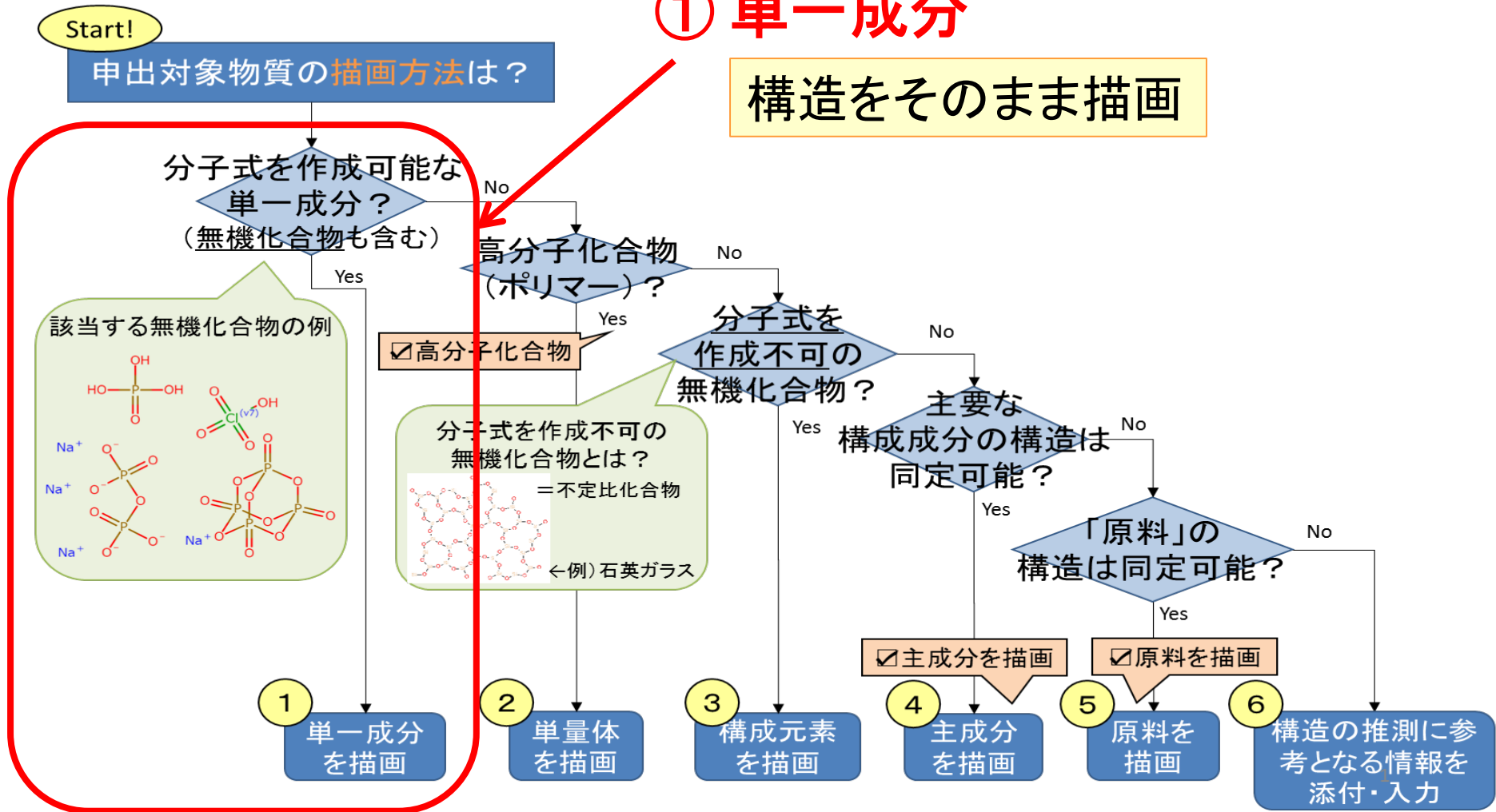
「原料の記載」

判断基準：申請する化学物質の構造が不明などで、原料を描画した場合は、「有」に☑

3. 構造描画上のルール及び注意点

① 単一成分

構造をそのまま描画

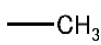
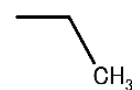
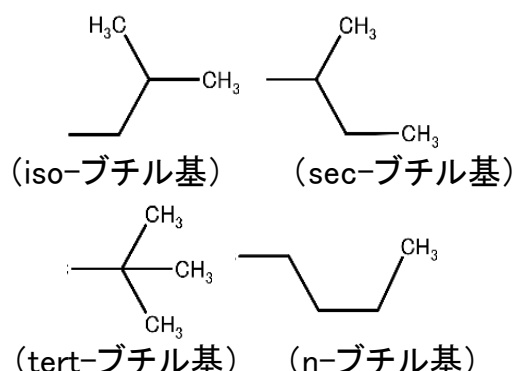
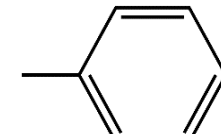


3. 構造描画上のルール及び注意点

① 単一成分の描画

官能基を描画する際の注意(1)

テキスト機能を用いた省略表記をしないでください。

例	OK の場合	NG の場合
メチル基 (Methyl)	○ 	× -Me
エチル基 (Ethyl)	○ 	× -Et or -C ₂ H ₅
ブチル基 (Butyl)	○  (iso-ブチル基) (sec-ブチル基) (tert-ブチル基) (n-ブチル基)	× Bu or C ₄ H ₉
フェニル基 (Phenyl)	○ 	× Ph or C ₆ H ₅

※ 炭素(C、CH、CH₂、CH₃)、水素(H)の記載は省略可能

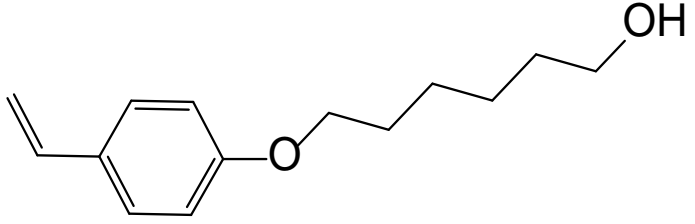
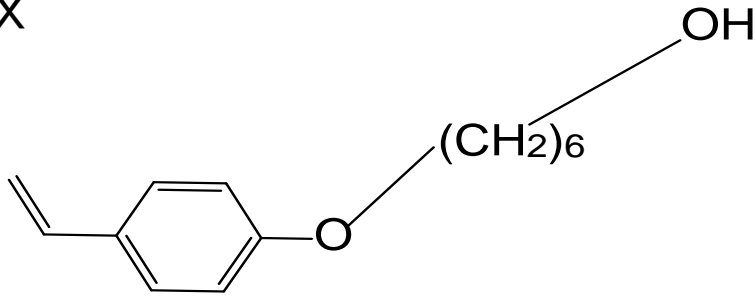
3. 構造描画上のルール及び注意点

① 単一成分の描画

官能基を描画する際の注意(2)

炭素などの繰り返し部分は省略せず展開して描画

例)

OKの場合	NGの場合
<p data-bbox="218 675 268 719">○</p> 	<p data-bbox="994 675 1043 719">X</p> 

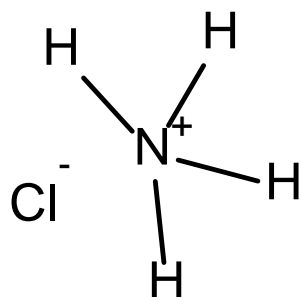
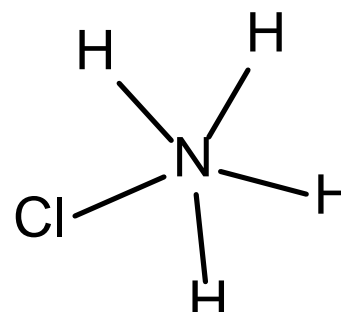
メチレン鎖(−(CH₂)_n−)は省略せず展開してすべて描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

① 単一成分の描画 **イオン結合を有する化合物の描画(1)**

対となるイオンを電荷を含めて描画

例)

	OKの場合		NGの場合
○	$\text{Cl} \quad \text{Na}^+$ (塩化ナトリウム)	x	$\text{Cl} \text{---} \text{Na}$
○	 (塩化アンモニウム)	x	

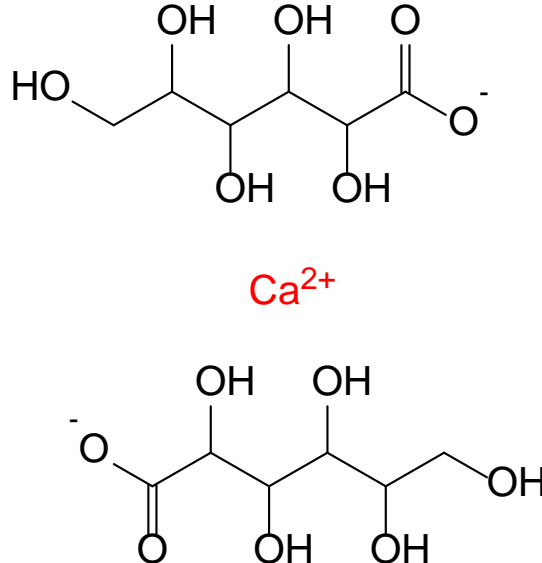
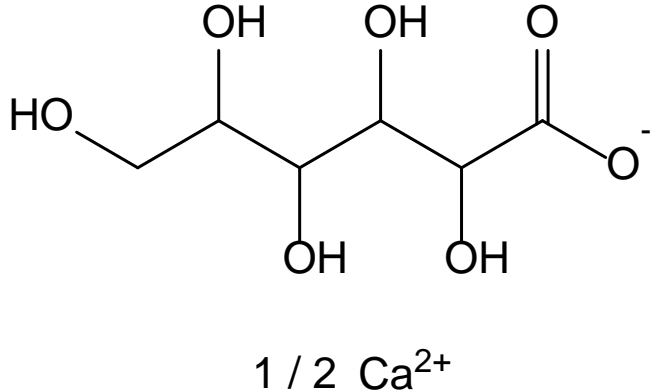
イオン結合は単結合で表現せず、イオンをそれぞれ描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

① 単一成分の描画 **イオン結合を有する化合物の描画(2)**

イオンの係数が整数となるよう描画

例) グルコン酸カルシウム

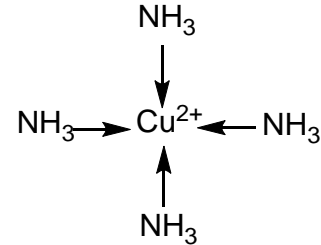
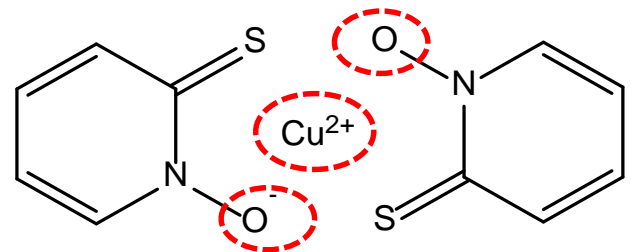
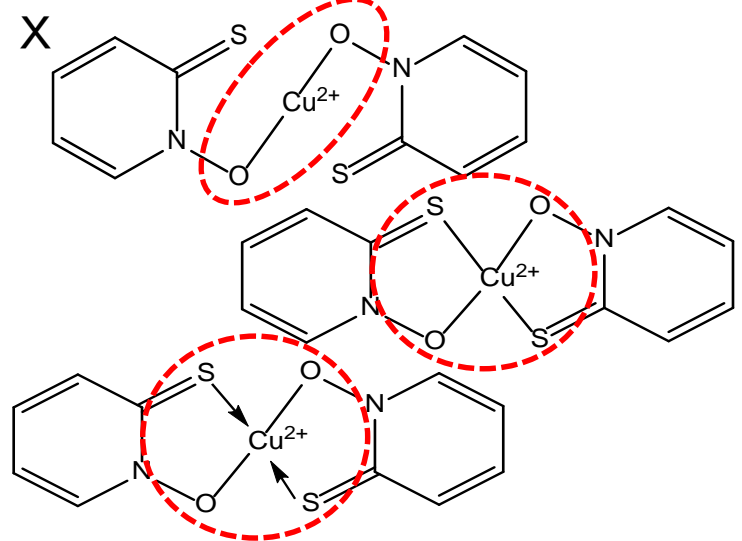
OKの場合	NGの場合
<p data-bbox="248 601 298 645">○</p>  <p data-bbox="576 868 675 912">Ca^{2+}</p>	<p data-bbox="984 601 1033 645">X</p>  <p data-bbox="1272 1061 1471 1105">$1/2 Ca^{2+}$</p>

対イオンを2つ描画するなどして、イオンの係数が整数になるように描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

① 単一成分の描画 配位結合を有する化合物の描画

イオン結合と同様に、対となるイオンを電荷を含めて描画

OKの場合	NGの場合
<p>○</p> <p style="text-align: center;">NH₃</p> <p style="text-align: center;">NH₃ Cu²⁺ NH₃</p> <p style="text-align: center;">NH₃</p> <p style="text-align: right;">(銅アンモニウム (イオン))</p>	<p>X</p> 
<p>○</p>  <p style="text-align: center;">(銅ピリチオン)</p>	<p>X</p> 

配位結合も単結合で表現せず、イオンとしてそれぞれ描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

① 単一成分の描画

水和物の描画

水分子は記載しないでください。

例) ヒドラジン水和物

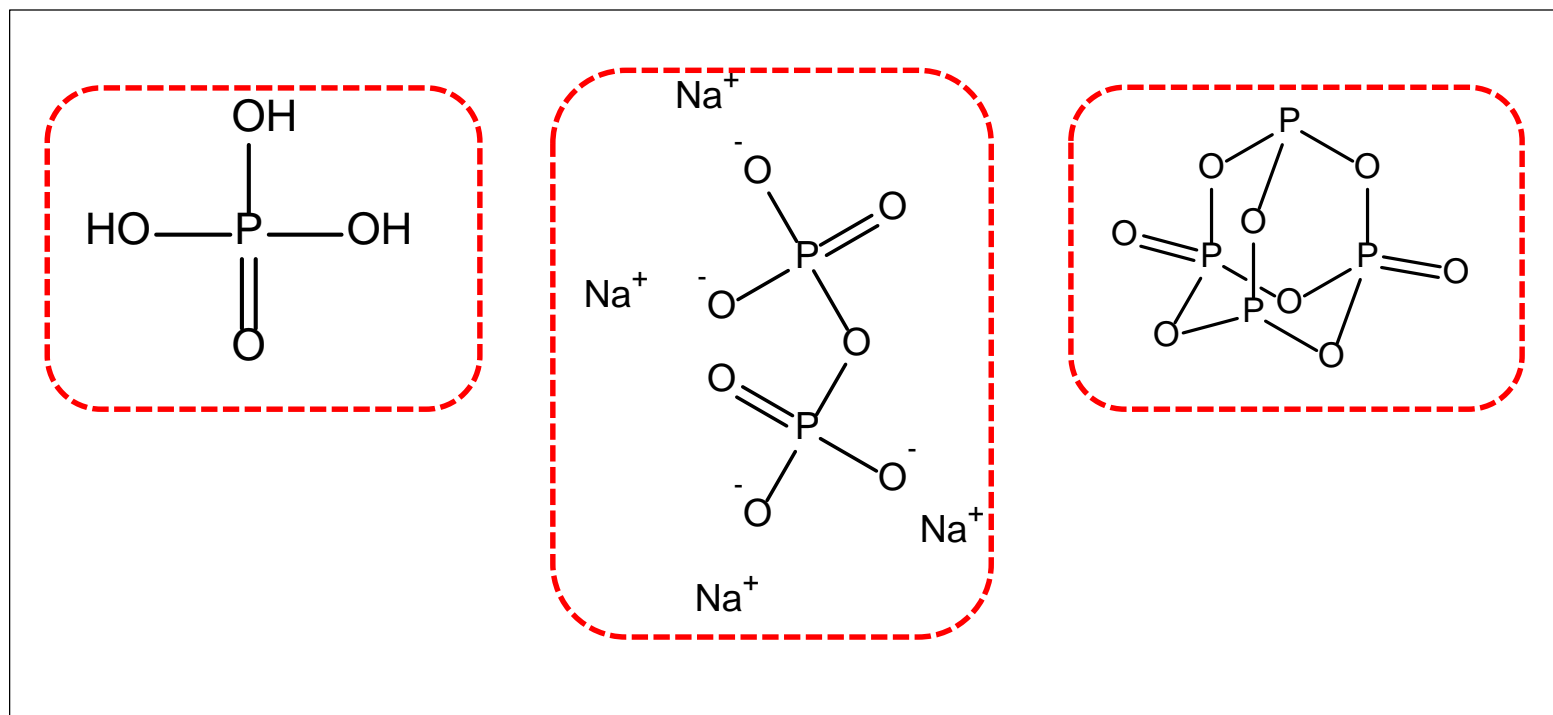
OKの場合	NGの場合
<p>○</p> <p>Chemical structure of hydrazine (H₂N-NH₂) is shown, consisting of two nitrogen atoms connected by a single bond, with two hydrogen atoms attached to each nitrogen.</p>	<p>X</p> <p>Chemical structure of hydrazine hydrate (H₂N-NH₂ · H₂O) is shown, consisting of a hydrazine molecule (H₂N-NH₂) and a water molecule (H-O-H) drawn separately.</p>

3. 構造描画上のルール及び注意点

① 単一成分の描画

無機物の描画

単一成分として描画(構造を表現)

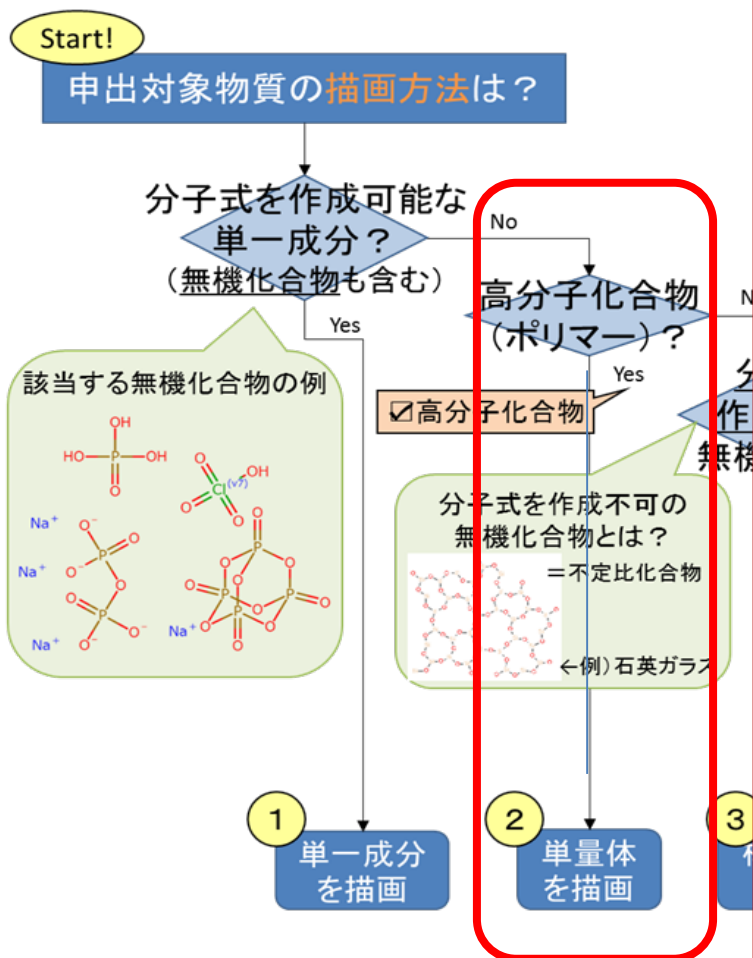


※ 構造の同定ができない、または描画が困難である場合には、③にて後述

3. 構造描画上のルール及び注意点

② 高分子化合物の描画

定義



高分子化合物の定義:

- (i) 1種類以上の単量体の連鎖(繰り返し構造)により生成する分子の集合から構成され、3連鎖以上の分子の合計重量が全体の50%以上を占め、かつ同一分子量の分子の合計重量が全体の50%未満であること。
- (ii) 数平均分子量が1,000以上であること。

3. 構造描画上のルール及び注意点

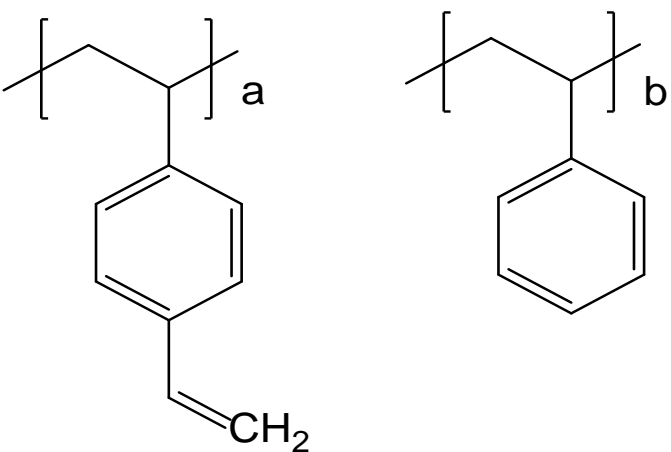
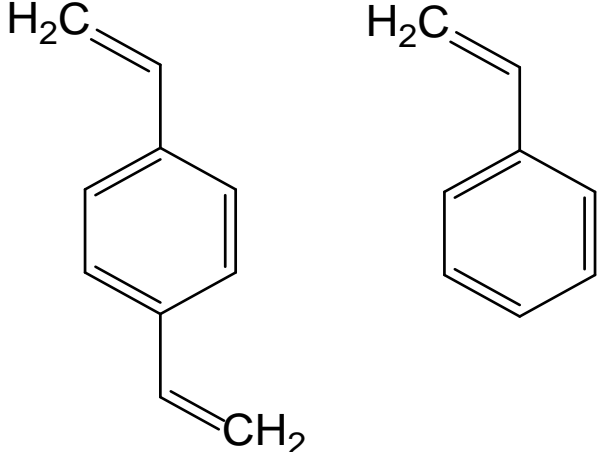
② 高分子化合物の描画

単量体の描画(1)

単量体の結合点は反応点として描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式 ⇒単量体
	

3. 構造描画上のルール及び注意点

② 高分子化合物の描画

単量体の描画(2)

単量体の結合点は反応点として描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
ポリエステル例：無水マレイン酸とエチレングリコールの重縮合物	

反応点は、カルボキシ基(—COOH)とヒドロキシ基(—OH)にしてください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

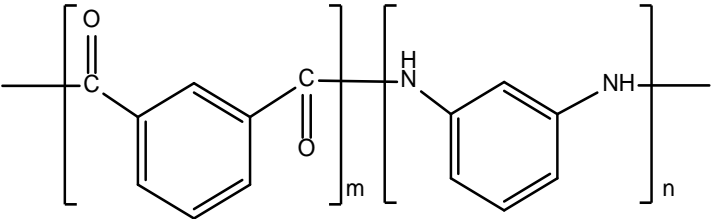
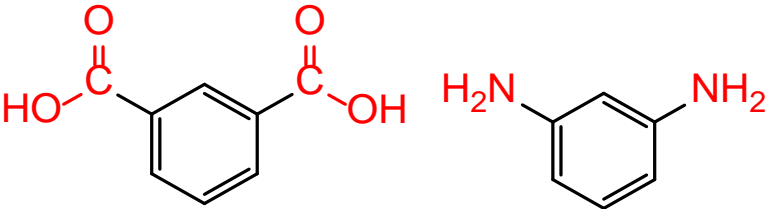
② 高分子化合物の描画

単量体の描画(3)

単量体の結合点は反応点として描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
ポリアミドの例 : イソフタル酸ジクロライドとm-フェニレンジアミンの重縮合物	
	

反応点は、カルボキシ基(−COOH)とアミノ基(−NH₂)にしてください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

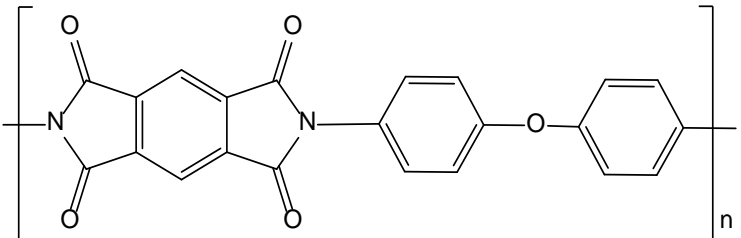
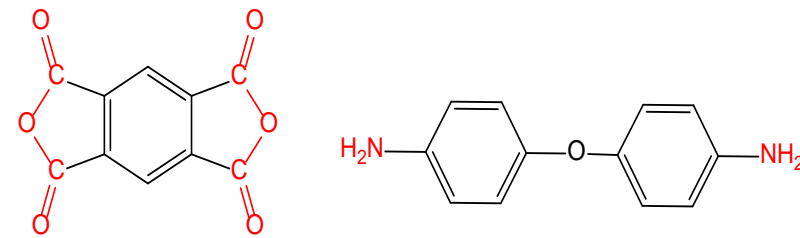
② 高分子化合物の描画

単量体の描画(4)

単量体の結合点は反応点として描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
ポリイミドの例 : ベンゼン-1, 2, 4, 5-テトラカルボン酸二無水物と4, 4'-ジアミノジフェニルエーテルの重縮合物	
	

反応点は、**酸無水物**($-\text{CO}-\text{O}-\text{CO}-$)と**アミノ基**($-\text{NH}_2$)にしてください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

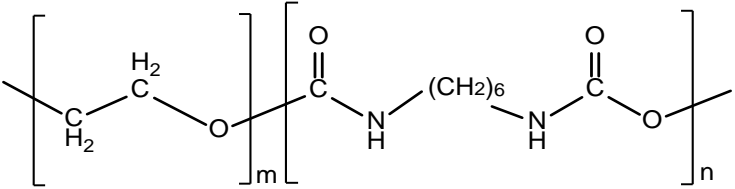
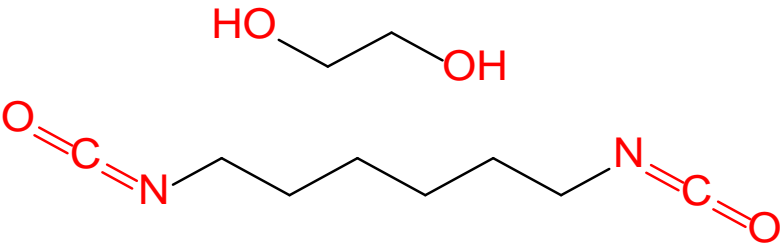
② 高分子化合物の描画

単量体の描画(5)

単量体の結合点は反応点として描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
ポリウレタンの例 : エチレングリコールとヘキサメチレンジイソシアネートの重付加物	
	

反応点は、**ヒドロキシ基(-OH)**と**イソシアナト基(-N=C=O)**にしてください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

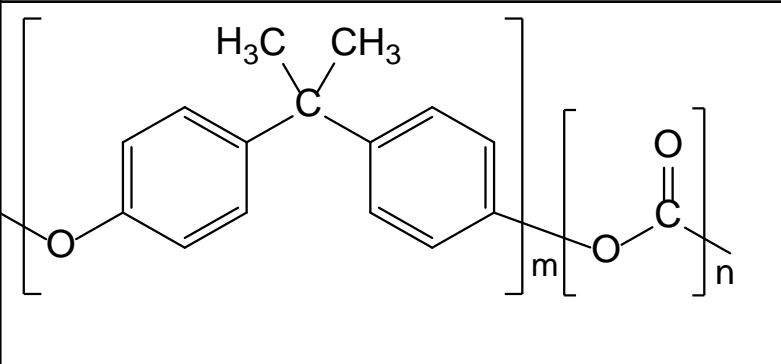
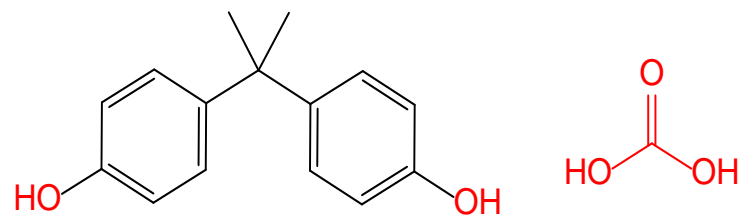
② 高分子化合物の描画

単量体の描画(6)

単量体の結合点は反応点として描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
ポリカーボネートの例 : 2, 2-ビス(4-ヒドロキシフェニル)プロパンとホスゲンの重縮合物	
	

反応点は、**ヒドロキシ基(-OH)**と**炭酸(HO-CO-OH)**にしてください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

② 高分子化合物の描画

単量体の描画(7)

単量体の結合点は反応点として描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
ポリシロキサンの例 : ジメチルシランジオール	

反応点は、**ヒドロキシ基(-OH)**にしてください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

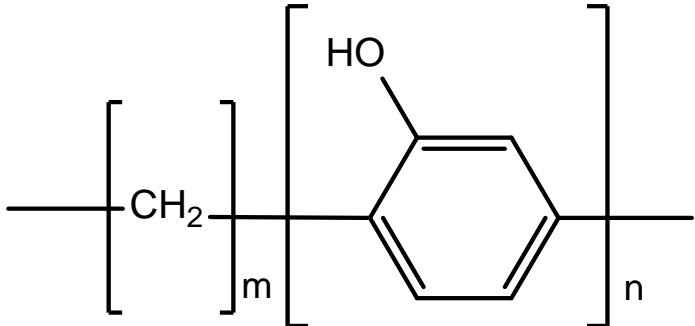
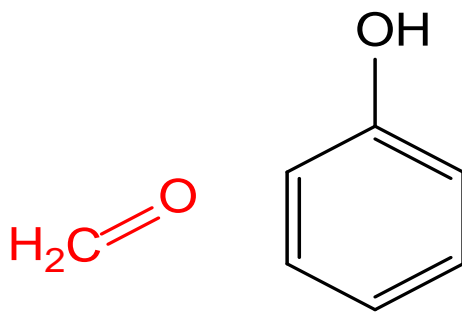
② 高分子化合物の描画

単量体の描画(8)

単量体の結合点は反応点として描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例)メチレンによる架橋高分子の場合のホルムアルデヒドの描画	
	

ホルムアルデヒドとそのほかの原料を描画してください。

※ 単量体の描画につきましては、FAQ p.17の参考もご参照ください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

② 高分子化合物の描画

末端封止剤の描画(1)

末端封止剤は原料(製造時に投入する化学物質)で描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例) アクリル酸・メタクリル酸共重合物の末端をドデカン-1-チオールで封止した高分子化合物	
<p>$R - \left[\begin{array}{c} \text{H}_2 \\ \\ \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{C}=\text{O} \\ \\ \text{OH} \end{array} \right]_m - \left[\begin{array}{c} \text{H}_2 \\ \\ \text{C} - \text{C}(\text{CH}_3) \\ \\ \text{C}=\text{O} \\ \\ \text{OH} \end{array} \right]_n - R$<p>R=H, C₁₂H₂₅-S-</p></p>	<p>(末端封止剤)</p>

末端封止剤は原料の構造を描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

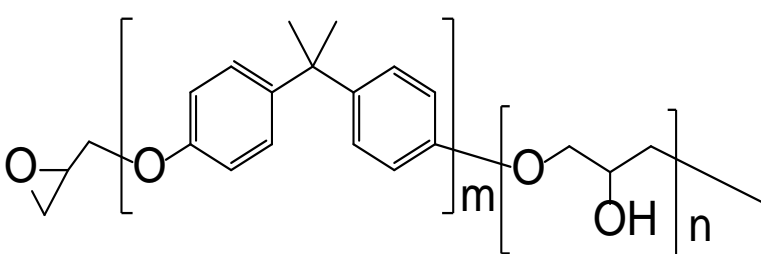
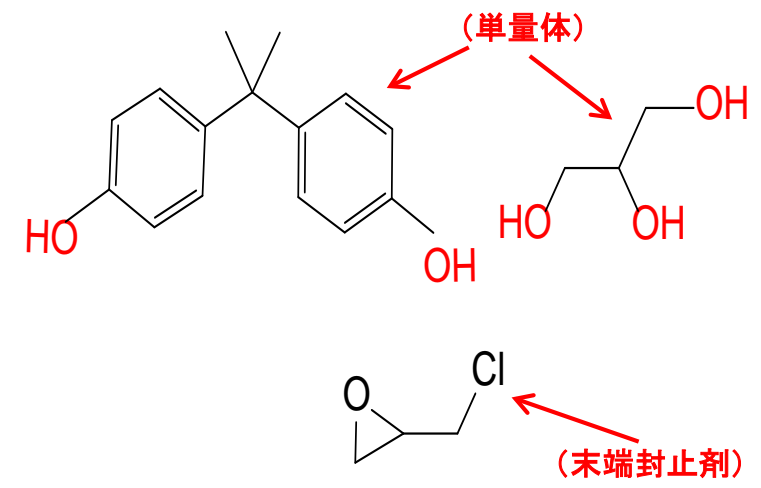
② 高分子化合物の描画

末端封止剤の描画(2)

末端封止剤は原料(製造時に投入する化学物質)で描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例) 2, 2-ビス(4'-ヒドロキシフェニル)プロパンと2-クロロメチルオキシランの重合反応物	
	

単量体及び末端封止剤としてそれぞれ描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

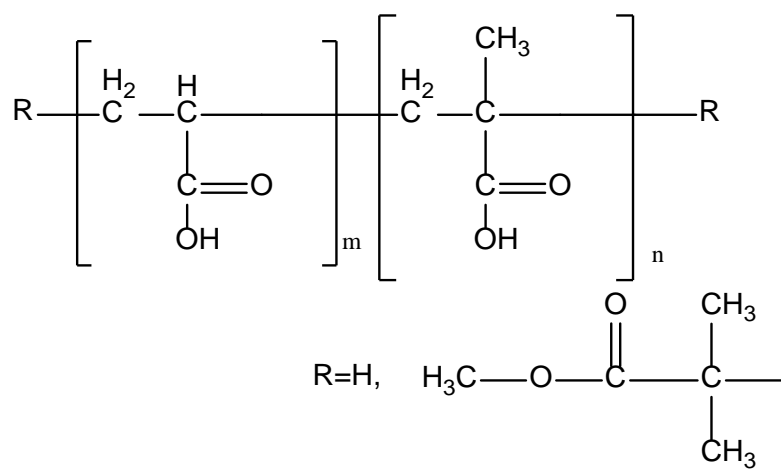
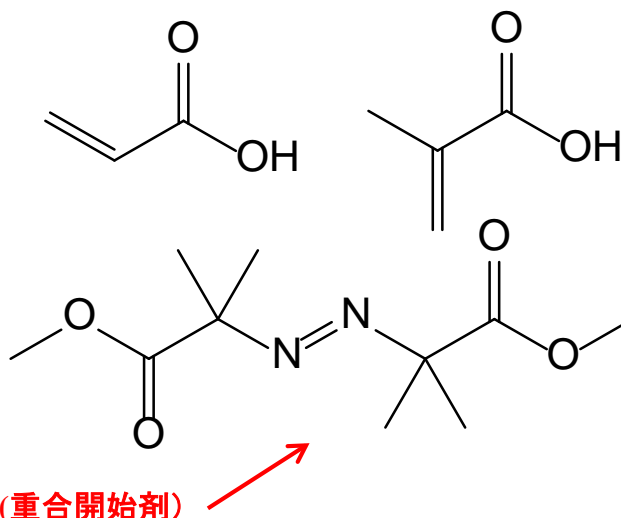
② 高分子化合物の描画

重合開始剤の描画

重合開始剤は原料(製造時に投入する化学物質)で描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例)ジメチル=2, 2'-(ジアゼン-1, 2-ジイル)ビス(2-メチルプロパノアート)を開始剤とするアクリル酸・メタクリル酸共重合物	
	

重合開始剤は原料の構造を描画してください。

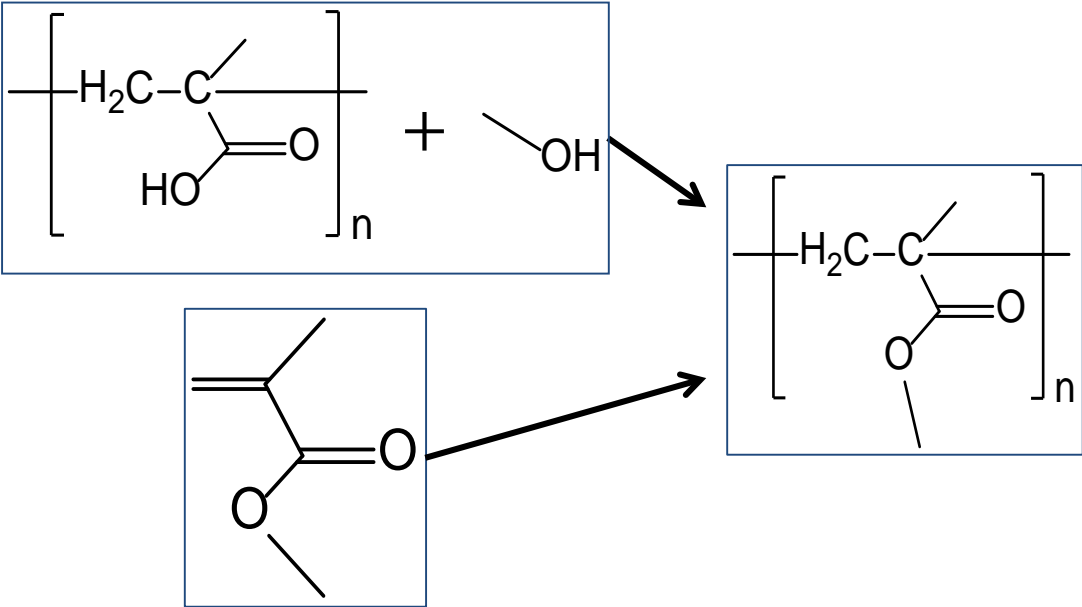
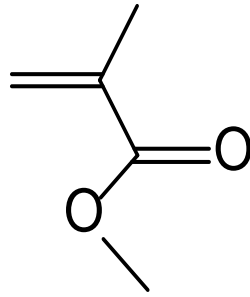
3. 構造描画上のルール及び注意点

② 高分子化合物の描画 高分子化合物を原料とする反応生成物(1)

- ・反応後の単量体を描画
- ・未反応の単量体が存在する場合は、未反応の単量体も描画

高分子化合物の記載 にチェック

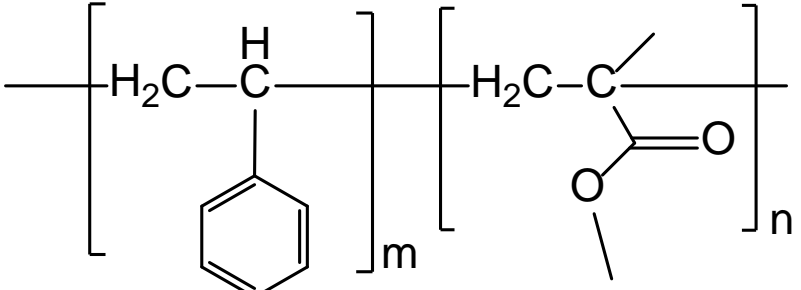
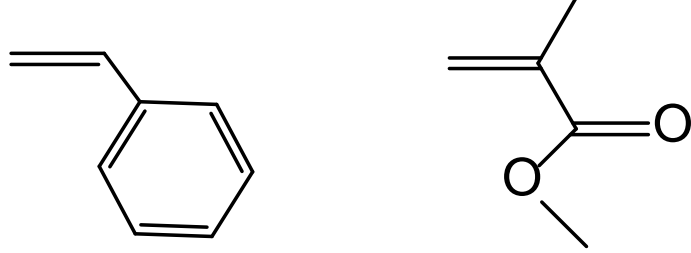
原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例) メタクリル酸メチル重合物	
	

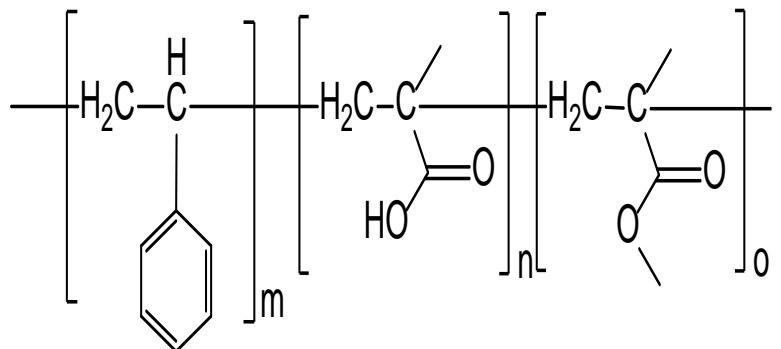
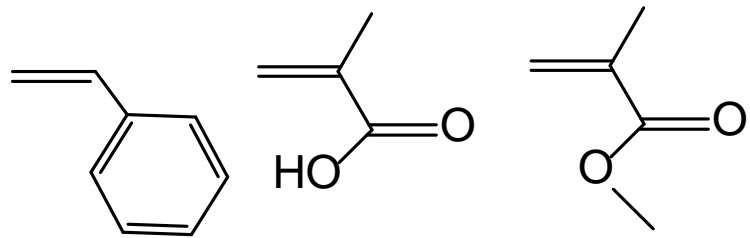
反応の経路にかかわらず、申出物質構造(反応後の単量体)を描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

② 高分子化合物の描画 高分子化合物を原料とする反応生成物(2)

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例 I) スチレン・メタクリル酸のエステル化反応生成物(100% エステル化する場合)	
	

反応後の単量体を描画してください。

例 II) スチレン・メタクリル酸のエステル化反応生成物(エステル化しないメタクリル酸が残存する場合)	
	

未反応の単量体及び反応後の単量体を描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

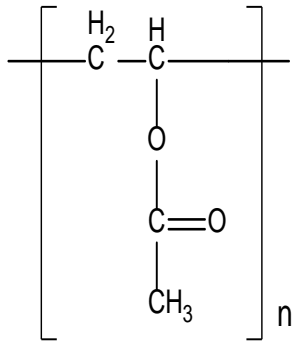
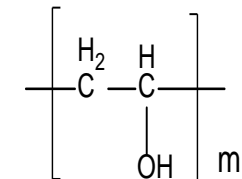
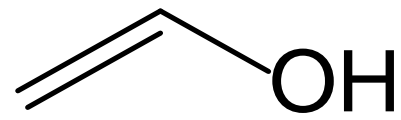
② 高分子化合物の描画

加水分解反応生成物

- ・加水分解反応後の単量体を描画
- ・未反応の単量体が存在する場合は、未反応の単量体も描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例) 酢酸ビニル重合体の加水分解反応生成物	
 <p>酢酸ビニル 重合体</p>	 <p>ポリビニル アルコール</p> 

反応後の単量体を描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

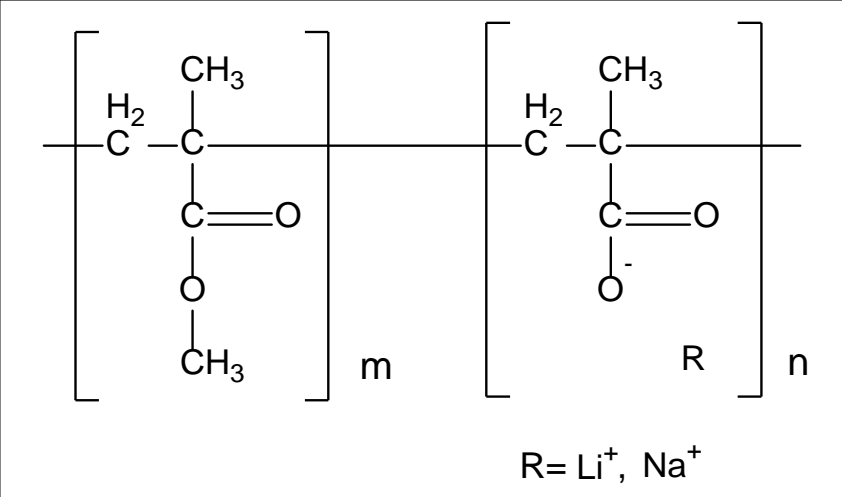
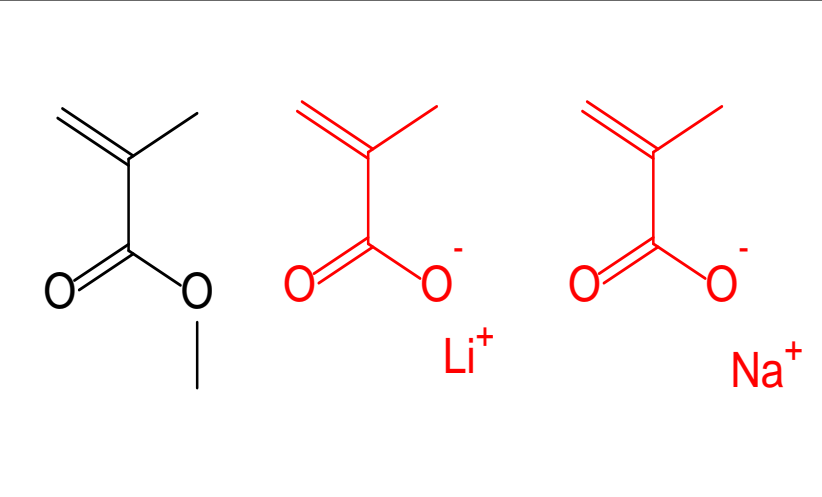
② 高分子化合物の描画

カウンターイオン

- ・カウンターイオンはすべて描画
- ・カウンターイオンごとに単量体を描画

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例) メタクリル酸メチル・メタクリル酸軽金属(Li、Na)塩共重合物	
 <p>$R = \text{Li}^+, \text{Na}^+$</p>	

ナトリウムイオン、リチウムイオンそれぞれに対して、アニオン部分を描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

② 高分子化合物の描画

側鎖部分の描画

- ・側鎖部分も含めて単量体を描画
- ・側鎖部分の繰り返し構造は主成分の繰り返し数で描画（特に指定されていない場合はn=1で描画）

主成分を記載 にチェック

高分子化合物の記載 にチェック

原料の記載 にチェックしないでください。

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
例) 単量体の側鎖部分に繰り返し構造が含まれる場合	
<p>$n=1\sim 10$</p>	

主成分が特定されていない場合、最も小さい繰り返し数を選択してください。

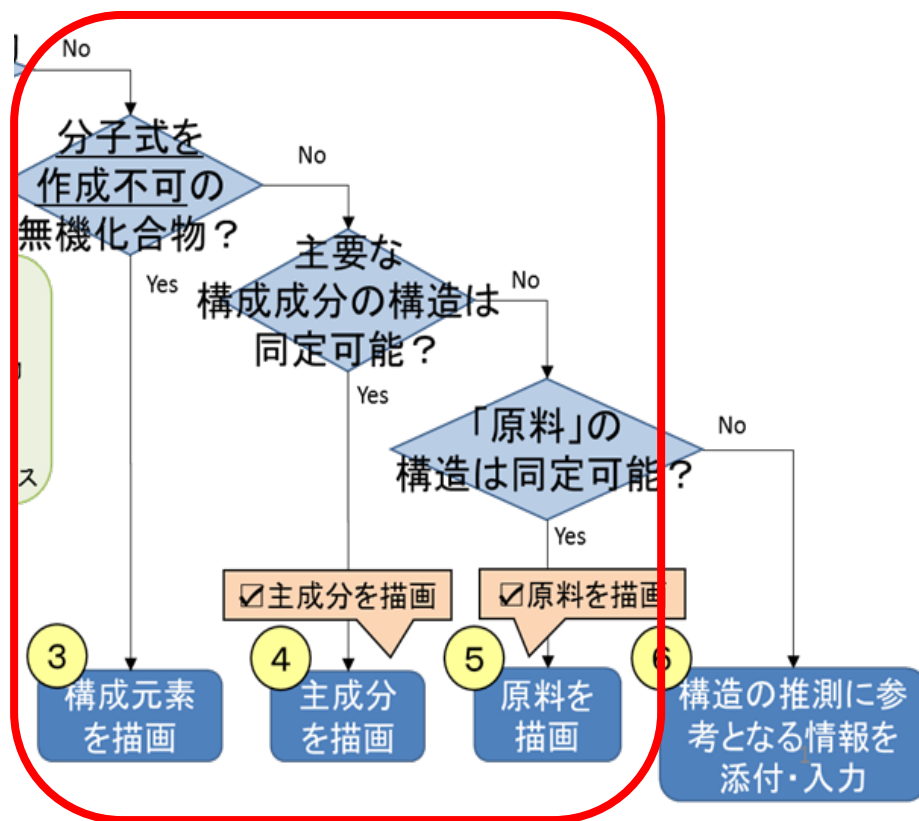
3. 構造描画上のルール及び注意点

③分子式を作成不可の無機化合物

④主成分

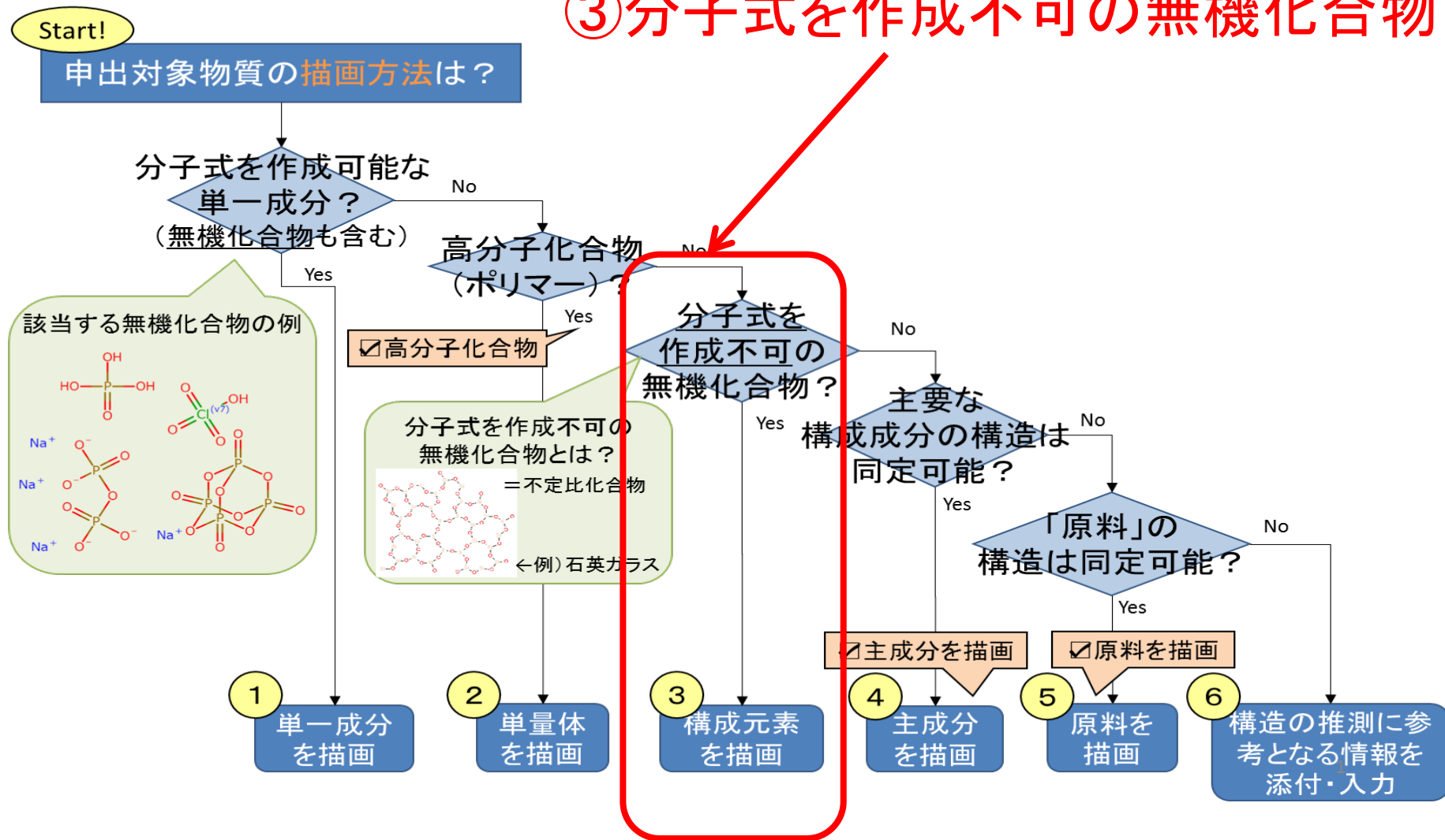
⑤原料

高分子化合物に該当しない場合
= (i)、(ii)のいずれか又は両方に該当しない場合
(繰り返し構造を持っていても数平均分子量の下限値が1,000未満の場合など)



3. 構造描画上のルール及び注意点

③分子式を作成不可の無機化合物



3. 構造描画上のルール及び注意点

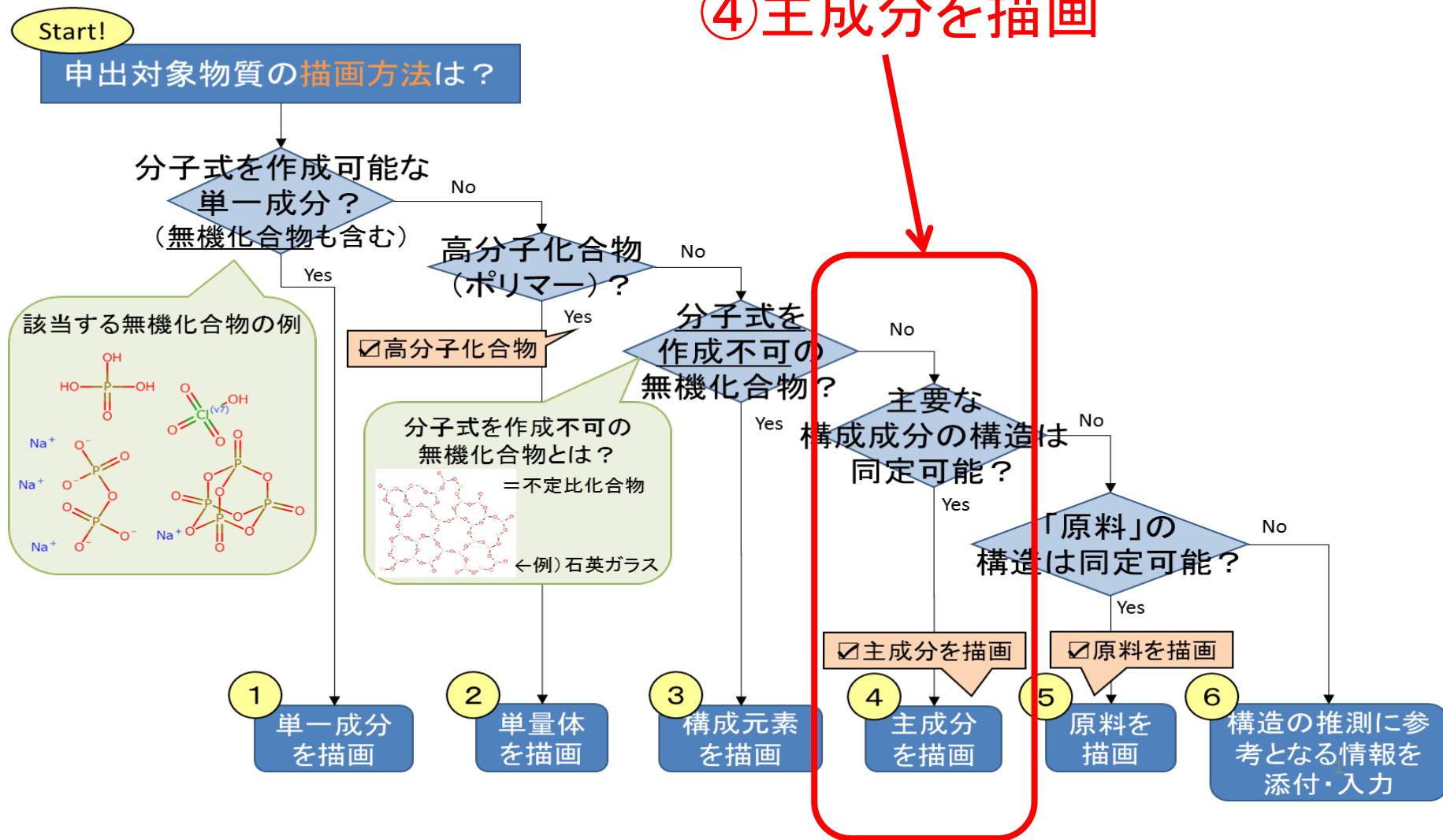
③ 分子式を作成不可の無機化合物

構成元素を併記して描画（組成比率は不要）

申し出たい物質	描画する構造→構成元素を記載
$\text{Fe}_{0.8}\text{Cr}_{0.4}\text{Si}_{0.9}\text{Zn}_{1.5}\text{O}_{4.5}$	<div style="border: 2px solid red; border-radius: 15px; padding: 10px; display: inline-block;">Fe Cr Si Zn O</div>

3. 構造描画上のルール及び注意点

④主成分を描画



3. 構造描画上のルール及び注意点

④ 主成分の描画

置換基の選択(1)

置換基選択の基本ルール

置換基選択の基本ルール

- ・主成分が特定できる場合は、その構造を描画
- ・主成分が特定できない場合、ア>イ>ウのルールに従って描画
 - ア 分子量が最小になる構造を選択
 - イ 同一分子量の置換基構造が複数存在する場合は、最も分岐の少ない置換系を選択
 - ウ 同一置換基を有する異性体は、置換基の位置番号が最小になる構造を選択

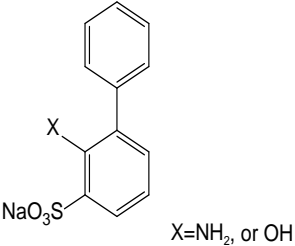
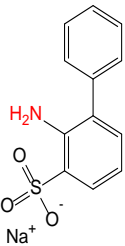
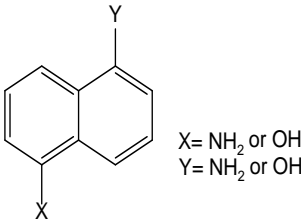
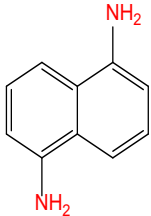
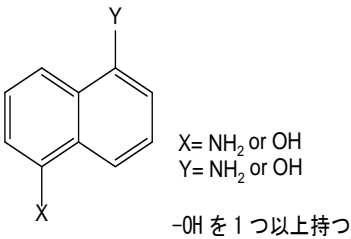
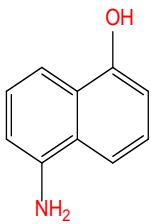
主成分を記載 にチェック

※高分子化合物等他の対象においても、主成分を描画する際には同様に適用されます。

3. 構造描画上のルール及び注意点

④ 主成分の描画

置換基の選択(2)

申し出たい物質	描画する構造式
①置換位置が1カ所の場合	
 <p>X = NH₂, or OH</p>	
②置換位置が複数ある場合	
 <p>X = NH₂ or OH Y = NH₂ or OH</p>	
③置換基の置換数に条件がある場合	
 <p>X = NH₂ or OH Y = NH₂ or OH -OHを1つ以上持つ</p>	

分子量のより小さい-NH₂
(アミノ基)を選択した構造
を描画

分子量のより小さい-NH₂
(アミノ基)を選択した構造を
描画

-OH(ヒドロキシ基)を1つ
配置した上で、分子量のよ
り小さい-NH₂(アミノ基)を
選択した構造を描画

3. 構造描画上のルール及び注意点

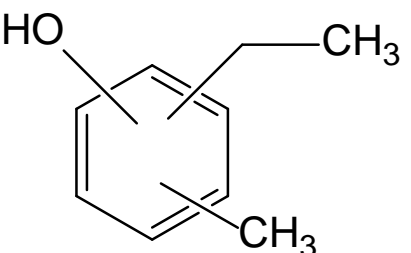
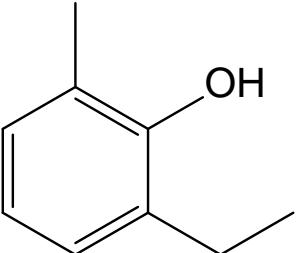
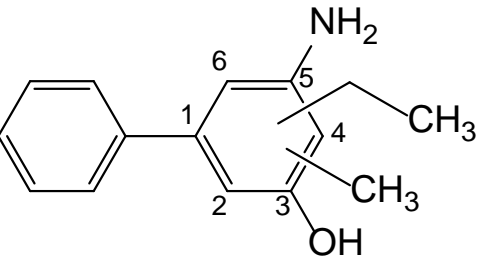
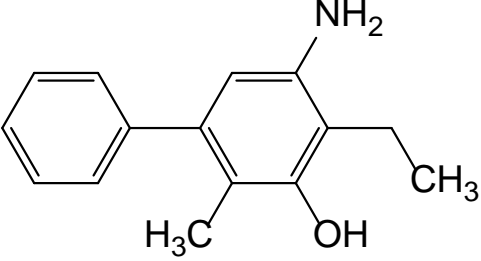
④ 主成分の描画

置換基の選択(3)

置換基の種類及び各置換基の数が確定しているが、置換基の結合位置のみが確定していない場合：
ウ及びウ'に従い描画

ウ' 異なる置換基を有する異性体は、置換位置不定の置換基を分子量が小さい順に配置した構造を選択(位置固定の置換基がある場合は、分子量が最も大きい位置固定の置換基の位置番号を1としたとき、位置番号が最小となる構造を選択)

主成分を記載 にチェック

申し出たい物質	選択する構造式
	
	

分子量の小さいメチル基、ヒドロキシ基、エチル基の順に配置した構造を選択

分子量の小さいメチル基、エチル基の順に、位置番号が小さくなる配置を選択(固定置換基で分子量が大きいフェニル基、ヒドロキシ基、アミノ基の順に、位置番号1、3、5とする。)

3. 構造描画上のルール及び注意点

④ 主成分の描画

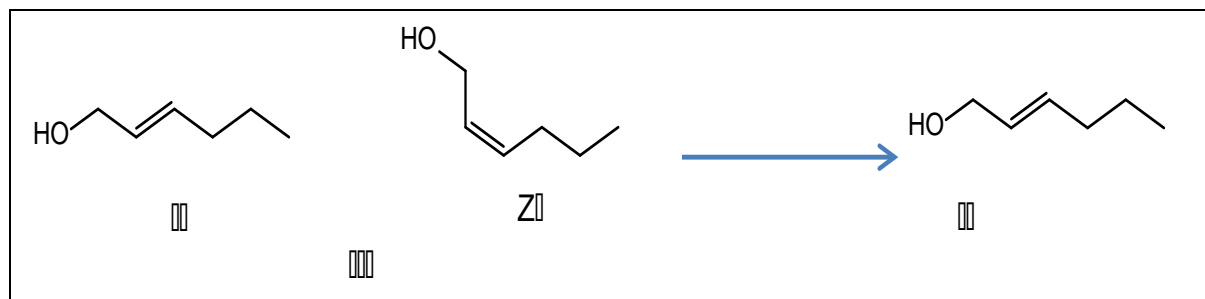
立体異性体(1)

置換基選択の基本ルール

- ・主成分が特定できる場合は、その構造を描画
- ・主成分が特定できない場合、下記のルールに従って描画

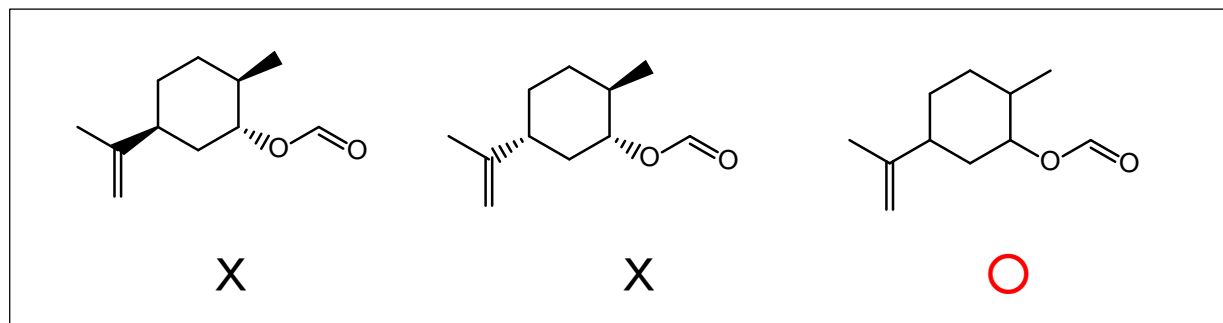
☑主成分を記載 にチェック

E体 及び Z体の混合物の場合



E体を描画してください。

R体 及び S体の混合物の場合



立体異性体を区別しない構造式を描画してください。

3. 構造描画上のルール及び注意点

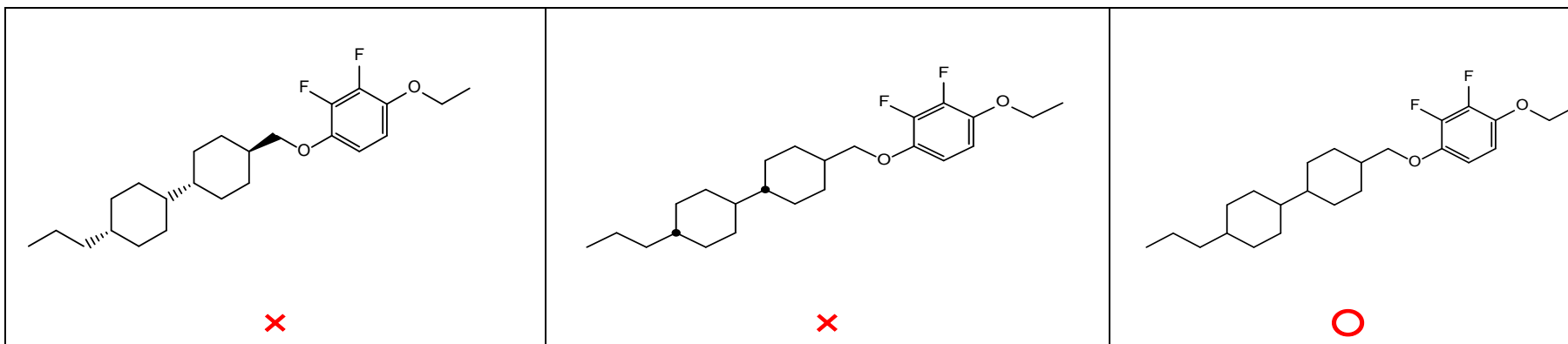
④ 主成分の描画

立体異性体(2)

置換基選択の基本ルール

- ・主成分が特定できる場合は、その構造を描画
- ・主成分が特定できない場合、下記のルールに従って描画

☑主成分を記載 にチェック



立体異性体を区別しない構造式を描画してください。

※立体構造で用いられる「・」を少量新規申出用構造式作成で使用することはできません。

3. 構造描画上のルール及び注意点

④ 主成分の描画

繰り返し構造を持つ場合(1)

高分子化合物に該当しないかチェックをしてください。

繰り返し構造が存在するときの基本ルール

・主成分が特定できる場合は、その構造を描画

I 繰り返し数の主成分が特定されている場合は、その繰り返し数に基づき省略せず描画

・主成分が特定できない場合、以下のルールに従って描画

II 繰り返し数に範囲があり、主成分が特定されている場合は、その繰り返し数に基づき省略せず描画

III 繰り返し数に範囲があり、主成分が不明な場合は、分子量が最小となるn数を描画

☑主成分を記載 にチェック

※高分子化合物等他の対象においても、主成分を描画する際には同様に適用されます。

3. 構造描画上のルール及び注意点

④ 主成分の描画

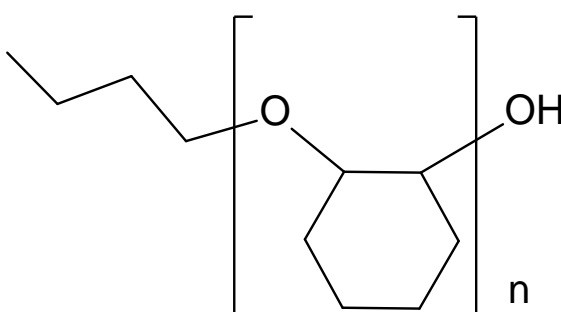
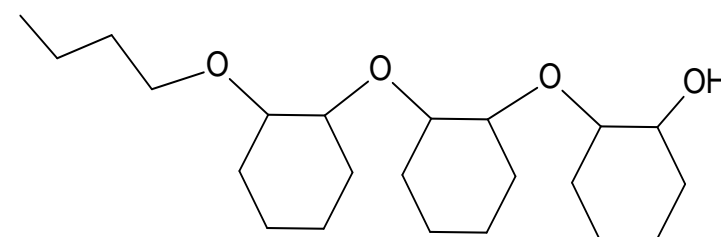
繰り返し構造を持つ場合(2)

II 繰り返し数に範囲があり、主成分が特定されている場合は、その繰り返し数に基づき省略せず描画

主成分を記載 にチェック

(例) $n=0\sim 10$ の範囲で主成分は $n=3$ として申出:

主成分である $n=3$ の構造を描画

申し出たい物質	描画する構造式
 <p>$n=0\sim 10$ 主成分は $n=3$</p>	

3. 構造描画上のルール及び注意点

④ 主成分の描画

繰り返し構造を持つ場合(3)

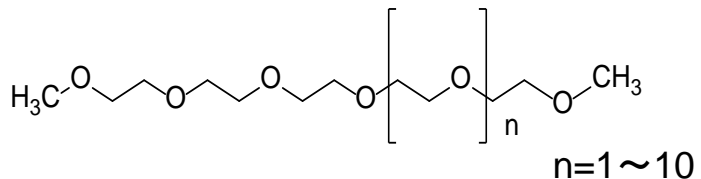
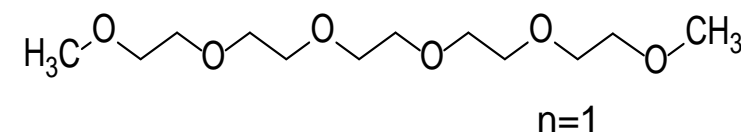
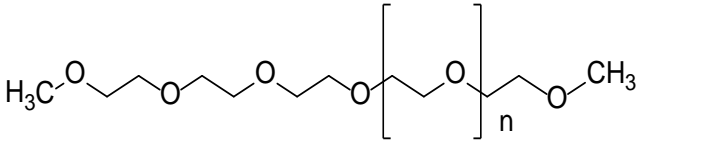
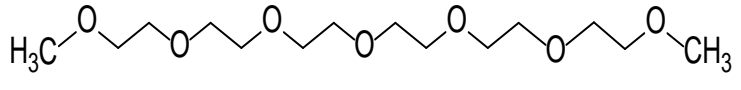
III 繰り返し数に範囲があり、主成分が不明な場合は、分子量が最小となるn数を描画

主成分を記載 にチェック

(例) n=0~10で申出：n=0の構造を描画

n=1~10で申出：n=1の構造を描画

n=0~10 (n=2, 3, 4のいずれかが主成分) で申出：n=2の構造を描画

申し出たい物質	描画する構造式
 n=1~10	 n=1
 n=0~10 ただし 主成分はn=2,3,4のいずれか	 n=2

3. 構造描画上のルール及び注意点

⑤ 原料の描画

①～④に当てはまらない場合（反応生成物で申出物質の構造が特定できない場合など）は、原料（製造時に投入する化学物質）をすべて描画

原料の記載 にチェック

申し出たい物質	描画する構造式
化学物質Xと化学物質Yの 反応生成物 (反応生成物の構造が不明などで表現できない)	化学物質Xの構造 化学物質Yの構造

- ・少量新規化学物質の申出における

構造式ファイルの作成についての問い合わせ先:

NITE化審法連絡システム(少量新規申し出について)

<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/kasinnrenraku/syouryou/syouryouForm.html>

- ・「NITE MOLファイル作成システム」

Marvin JSを用いた構造式描画ツールを提供

<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/syouryou/mol/>

- ・NITEのHPから、MOLファイル作成の説明動画を公開しています。ぜひご覧ください。

少量新規化学物質の構造式ファイルの作成については、十分な時間的余裕をもって準備いただくようお願いいたします。