有機化学物質届出に係る「合成反応」の定義

事例集

(化学兵器禁止法届出参考資料集4.2.2関係)

本資料は、冒頭に記載した「合成反応」の定義に基づき、各反応が合成に該当するか否かについての事例を示しています。

(右欄外に「合成に該当」、「合成に非該当」とある反応は、それぞれ、当運用に照らし、合成に該当するもの、合成に該当しないものです。)

有機化学物質として、製造量を計上するべきかについてお困りの場合は、当室までご相談下さい。

令和7年4月

経済産業省 大臣官房産業保安・安全グループ
化学物質管理課 化学兵器・麻薬原料等規制対策室

◎ 施行令第4条第2項の「合成反応」の定義

施行令第4条第2項の「合成反応」の定義は次のとおりです。

○基本的考え

「合成反応」とは、新たな共有結合を生じる化学反応のうち、一部の分解的反応を除外したもの。除外されるものとしては、加水分解反応の一部や、熱分解反応等の一部がある。

○定義

「合成反応」とは、(a) 又は (b) をいう。

(a) 生成した有機化学物質の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上（同数を含む）となる、新たな共有結合を生じる化学反応

(b) (イ) ～ (ニ) 以外の新たな共有結合を生じる化学反応

(イ) 水酸化物イオン (OH⁻) のOによる共有結合

(ロ) 水素イオン (H⁺、H₃O⁺) のHによる共有結合

(ハ) C-C結合

(ニ) C-H結合、又は官能基がHに置換されることによる共有結合

注：(b) については、炭素数が反応前の化合物の炭素数未満となる場合が該当。

○注意点等

- ・ 着目点は、新たにどのような共有結合が生じるか、です。
- ・ 上記定義に従えば、次のとおりとなります。
 - － 「比較的複雑な化合物から簡単な化合物を作ること」の中にも合成に該当するものがあります。分子量が小さくなる反応や、官能基が複雑なものから簡単なものになる化学反応の中にも合成に該当するものがあります。
 - － 「合成の逆反応」の中にも合成に該当するものがあります。
 - － 一般に「分解」と称される化学反応の中にも合成に該当するものがあります。
 - － 異性化についても、新たな共有結合を生じる場合は合成に該当します。
- ・ 抽出、精製、分離、混合、溶解、希釈等の物理的変化や、新たな共有結合を生じない化学反応は、合成ではありません。
新たな共有結合を生じない化学反応の例としては、イオン結合変化（中和反応、イオン交換反応、複分解反応など）や、配位結合形成（キレート剤の金属イオン捕捉によるキレート錯体生成反応など）があります。

加水分解 Hydrolysis

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少、かつ OH⁻のO、H⁺のHによる共有結合以外の新たな共有結合が生じない。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少、かつ OH⁻のOによる共有結合以外の新たな共有結合が生じない。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少、かつ OH⁻のO、H⁺のHによる共有結合以外の新たな共有結合が生じない。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-O結合、O-H結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C=O結合、N-H結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-O結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C=O結合、C-O結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。

加アルコール分解 Alcoholysis

エステルについては、OH⁻由来のOによらない新たな共有結合(C-O結合)が生じる。(R'とR''の炭素数の大小に関わらず、判定結果は同じ。)

加メタノール分解 Methanolysis

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上、かつ新たな共有結合(C-O結合)が生じる。

アルカンについては、炭素数が反応前の化合物(塩化アルキルマグネシウム)の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。

加エタノール分解 Ethanolysis

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上、かつ新たな共有結合(C-O結合)が生じる。

加酸分解 Acidolysis

エステルについては、OH⁻由来のOによらない新たな共有結合(C-O結合)が生じる。(RとR''の炭素数の大小に関わらず、判定結果は同じ。)

加酢酸分解 Acetolysis

エステルについては、炭素数が反応前の化合物(アルコール)の炭素数以上、かつ新たな共有結合(C-O結合)が生じる。また、酢酸については、炭素数が反応前の化合物(無水酢酸)の炭素数より減少するが、定義(b)(1)~(2)以外の新たな共有結合(O-H結合)が生じる。

加アンモニア分解 Ammonolysis

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-N結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(イ)～(ニ)以外の新たな共有結合(C-N結合、O-H結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(イ)～(ニ)以外の新たな共有結合(C-N結合、O-H結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-N結合、O-H結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(イ)～(ニ)以外の新たな共有結合(C-N結合、O-H結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。

光分解 Photolysis (ラジカル連鎖反応を含む)

合成に
非該当

新たな共有結合を生じない。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(O-H結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C=N結合、O-H結合)が生じる。

放射線分解 Radiolysis (ラジカル連鎖反応を含む)

合成に
非該当

新たな共有結合を生じない。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上、かつ新たな共有結合(C-C結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上、かつ新たな共有結合(C-C結合)が生じる。(参考)ポリアクリロニトリルは 合成の該非によらずDOCにはあたらない。

酸化分解 Oxidolysis

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(イ)～(ニ)以外の新たな共有結合(C-O結合、C=O結合)が生じる。
※ OH⁻由来のOでなく、MnO₄由来のOによる共有結合形成。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(イ)～(ニ)以外の新たな共有結合(C-O結合、C=O結合)が生じる。
※ OH⁻由来のOでなく、MnO₄由来のOによる共有結合形成。

オゾン分解 Ozonolysis

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(イ)～(ニ)以外の新たな共有結合(C=O結合)が生じる。
※ OH⁻由来のOでなく、オゾン(O₃)由来のOによる共有結合形成。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(イ)～(ニ)以外の新たな共有結合(C=O結合)が生じる。
※ OH⁻由来のOでなく、オゾン(O₃)由来のOによる共有結合形成。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(イ)～(ニ)以外の新たな共有結合(C-O結合、C=O結合)が生じる。
※ OH⁻由来のOでなく、オゾン(O₃)由来のOによる共有結合形成。

異性化

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合、C=O結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-C結合、N-H結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-C結合、C-H結合)が生じる。

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。

合成に
非該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少、かつ C-H結合以外の新たな共有結合が生じない。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-Cl結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-Br結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-N結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-Mg結合)が生じる。
※[単結合炭素-Mg]は共有結合と考えられる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-Mg結合)が生じる。
※[単結合炭素-Mg]は共有結合と考えられる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-Li結合)が生じる。
※[単結合炭素-Li]は共有結合と考えられる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-Cu結合)が生じる。
※[単結合炭素-Cu]は共有結合と考えられる。

付加

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合、N-H結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-Cl結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上、かつ新たな共有結合(C-C結合)が生じる。

脱離

合成に
非該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少、かつ C-H結合以外の新たな共有結合が生じない。

合成に
非該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少、かつ C-H結合以外の新たな共有結合が生じない。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ 新たな共有結合(C=C結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ 新たな共有結合(C=C結合)が生じる。

1-ヘキセン

シクロヘキセン

合成に
該当

シクロヘキサジエン

合成に
該当

ベンゼン

合成に
該当

- ①生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-C結合)が生じる。
- ②生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C=C結合)が生じる。
- ③生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C=C結合)が生じる。

アミン

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数より減少するが、定義(b)(1)~(2)以外の新たな共有結合(C-N結合)が生じる。

酸化

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C=O結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-O結合)が生じる。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-O結合)が生じる。

イオン結合変化

いずれの反応も、新たに生じる結合はイオン結合と考えられ、新たな共有結合を生じない。

合成に
非該当

新たな共有結合を生じない。([三重結合炭素-Li]はイオン結合と考えられる。)

合成に
非該当

新たな共有結合を生じない。([三重結合炭素-Na]はイオン結合と考えられる。)

合成に
非該当

新たな共有結合を生じない。([三重結合炭素-Ag]はイオン結合と考えられる。)

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。
※イオン結合変化の後、共有結合形成。

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。
※イオン結合変化の後、共有結合形成。

その他 無機化合物からの有機化合物合成

合成に
該当

生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-H結合)が生じる。

合成に
該当

いずれの反応も、生成した有機化合物の炭素数が反応前の化合物の炭素数以上(同数)、かつ新たな共有結合(C-N結合)が生じる。