

少量新規化学物質の構造式ファイル作成に関するFAQ

第1.1版

令和元年9月25日

経済産業省 製造産業局
化学物質管理課 化学物質安全室

独立行政法人 製品評価技術基盤機構
化学物質管理センター 安全審査課

改訂履歴

2018/9/14

Ver.1.0 公開

2019/9/25

Ver.1.1 公開 (Q-5 に具体例を追記、Q-8 を追加)

目次

単一成分等の描画について..... 4

- Q-1 : 申し出たい物質が、位置番号不定の置換基を複数有する化学物質の場合、どの構造式を描画するのか? 5
- Q-2 : 申し出たい物質が、置換基として複数の選択肢がある化学物質の場合、どの構造式を描画するのか? 5
- Q-3 : 申し出たい物質が、異性体混合物の場合、どの構造式を描画するのか? 7
- Q-4 : カウンターイオンの係数が整数にならない場合、どの構造式を描画するのか? .. 8
- Q-5 : 構造中に繰り返し成分を持つ場合、どの構造式を描画するのか? 9
- Q-6 : 無機化合物において、描画することが困難な化学物質(「リントングステン酸」等)は、どのように描画するのか? 10
- Q-7 : メタロセン錯体の配位子であるシクロペンタジエンのようにアニオン中心が特定できない化合物は、どのように描画するのか? 10
- Q-8 : 水和物の水は描画しないとガイダンスに記載があるが、水を描画しないといけないケースはあるのか? 10

高分子化合物の描画について..... 11

- Q-9 : ガイダンスにおける「高分子化合物」の定義は何か? 12
- Q-10 : 申し出たい物質が、高分子化合物を原料とする反応生成物(「(A・B共重合物)とCの反応生成物」等)である場合、どのように描画するのか? 12
- Q-11 : 高分子化合物の描画において、単量体の構造に繰り返し成分を持つ場合、どのように描画するのか? 13
- Q-12 : 重縮合物等の単量体はどのように描画するのか? 13
- Q-13 : 高分子化合物を特定の原料を用いて末端を封止する場合、どのように描画するのか? 15
- Q-14 : 高分子化合物について、申出名称に開始剤が含まれる場合、どのように描画するのか? 16
- Q-15 : 高分子化合物を塩素化する場合、どのように描画するのか? 17
- Q-16 : 高分子化合物を加水分解する場合、どのように描画するのか? 17
- Q-17 : 高分子化合物において、カウンターイオンの種類が複数ある場合、どのように描画するのか? 18

【参考】高分子化合物の単量体として描画する構造式及び主成分の構造が同定できない場合等に原料として描画する構造式の例 19

単一成分等の描画について

Q-1 : 申し出たい物質が、位置番号不定の置換基を複数有する化学物質の場合、どの構造式を描画するのか？

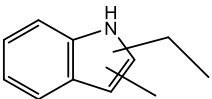
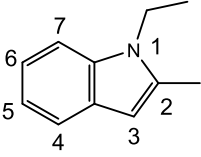
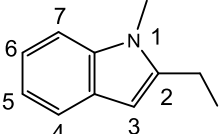
A-1 :

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（以下、「ガイダンス」）2.3.4 (p.7) 図表 2.5「含有率が明確な場合」のルールに従い、含有率が最も大きい成分の構造式を描画してください。

含有率が不明な場合には、ガイダンス 2.3.4 (p.7) 図表 2.5「含有率が不明な場合」に従い、置換基を分子量が小さい順に配置した構造式を描画してください。

また、上記のいずれの場合も、申出書の「主成分を記載」にチェックを入れてください。

例) インドール環に結合するメチル基及びエチル基の位置番号が不明な場合（各成分の含有率が不明な場合に限る。）

申し出たい物質	描画する構造式
	<div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;">  <p>×</p> </div> <div style="text-align: center;">  <p>○</p> </div> </div>

分子量の小さいメチル基を1位とし、分子量の大きいエチル基を2位とする構造式を描画します。

Q-2 : 申し出たい物質が、置換基として複数の選択肢がある化学物質の場合、どの構造式を描画するのか？

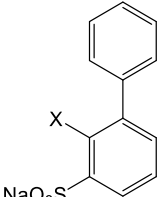
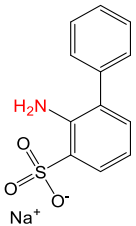
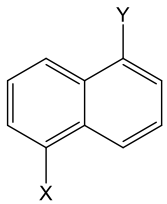
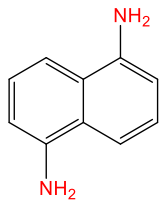
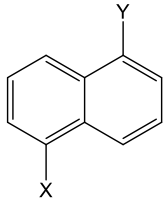
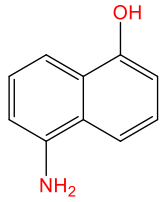
A-2 :

ガイダンス 2.3.4 (p.7) 図表 2.5 のルールに従い、含有率が最も大きい成分の構造式を描画してください。含有率が不明な場合は、以下をご参考にしてください。

- ① 置換位置が1カ所の場合：分子量の最も小さい置換基を選択し、図表 2.5 のルールに従い描画してください。
- ② 置換位置が複数ある場合：それぞれ置換位置について最も分子量の小さい置換基を選択し、図表 2.5 のルールに従い描画してください。
- ③ 各置換基の置換数に条件がある場合はその条件を考慮してください。

また、上記のいずれの場合も、申出書の「主成分を記載」にチェックを入れてください。

例) 各成分の含有率が不明な場合

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>	
分子量のより小さい-NH ₂ (アミノ基) を選択した構造を描画します。	
②置換位置が複数ある場合	
 <p>X = NH₂ or OH Y = NH₂ or OH</p>	
それぞれの置換位置において、分子量のより小さい-NH ₂ (アミノ基) を選択した構造を描画します。	
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>	
-OH (ヒドロキシ基) を少なくとも1つ持つという条件を満たし、かつ、分子量のより小さい構造式 (-NH ₂ (アミノ基) を1つ、-OH を1つ有する構造式) を描画します。	

Q-3 : 申し出たい物質が、異性体混合物の場合、どの構造式を描画するのか？

A-3 :

ガイダンス 2.3.4 (p.7) 図表 2.5 のルールに従い、主成分が特定できる場合は主成分の構造式を描画してください。

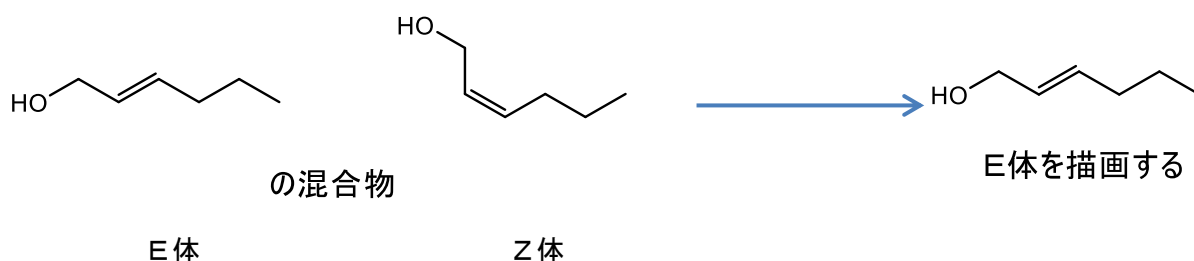
成分の含有率が不明で主成分の構造を特定できない場合は、「破線」「くさび」「波線」による結合線は使用せずに、以下の事例に従い構造式を描画してください。

また、上記のいずれの場合も、申出書の「主成分を記載」にチェックを入れてください。

例) 各成分の含有率が不明な場合

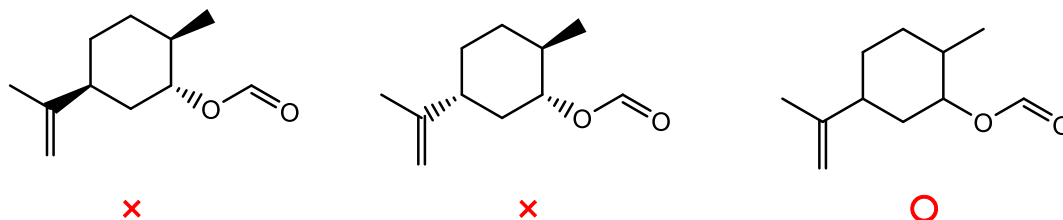
< E体及びZ体の混合物の場合 >

E体及びZ体はいずれも同一の物質として取り扱うため、E体の構造式を描画してください。



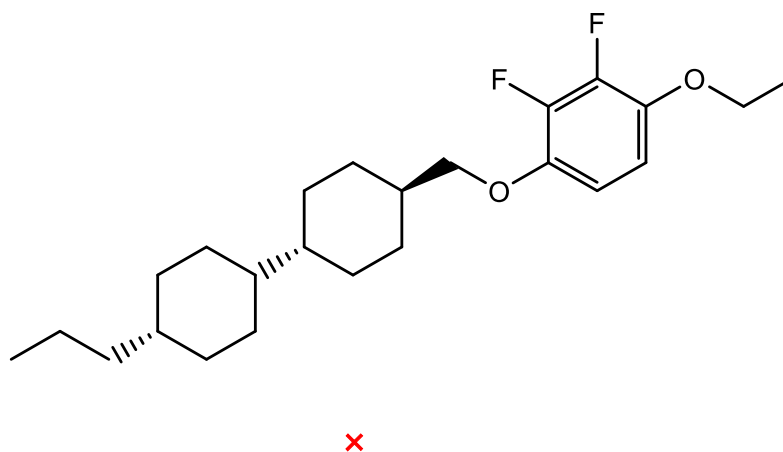
< R体及びS体の混合物の場合 >

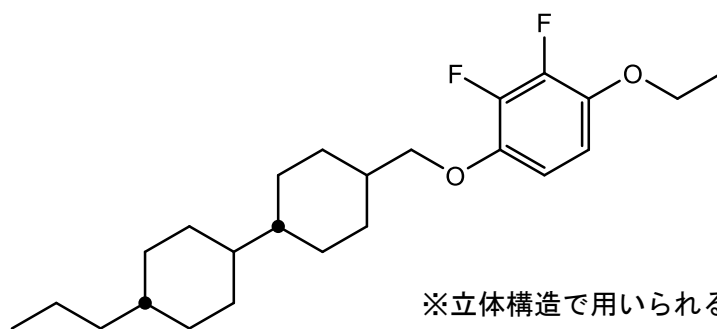
立体異性体を区別しない構造式を描画してください。



< 単環における cis 体及び trans 体の混合物の場合 >

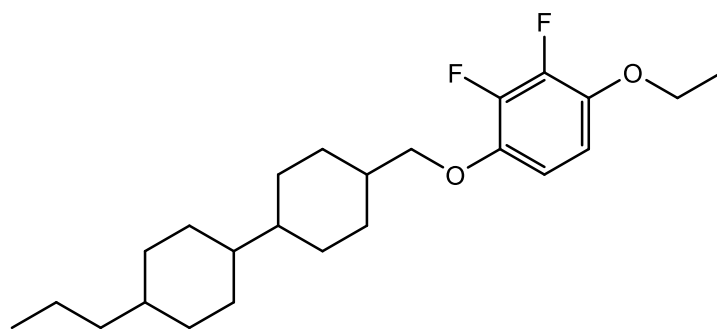
立体異性体を区別しない構造式を描画してください。





×

※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。



○

Q-4 : カウンターイオンの係数が整数にならない場合、どの構造式を描画するのか？

A-4 :

イオン結合を有する塩はガイダンス 3.1 (p. 11) に従い、カチオン及びアニオンをそれぞれ描画してください。カチオン又はアニオンの係数が整数にならない場合、係数が整数になるよう調整して描画してください。

例) グルコン酸カルシウム

化合物の代表構造例	描画する構造式
$1/2 \text{ Ca}^{2+}$	Ca^{2+}

カルシウムの係数が1になるように、アニオンを2つ描画します。係数を使って描画しないでください。

Q-5 : 構造中に繰り返し成分を持つ場合、どの構造式を描画するのか？

A-5:

ガイダンス 2.3.4 (p.7) 図表 2.5 のルールに従い、描画する構造を選択してください。具体的には、以下の①～③を順にご参考にしてください。

- ① 繰り返し数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してください。

例)

n=3 で申出 : n=3 に該当する構造を省略せずに描画してください。

- ② 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してください。

例)

n=0 ~10 の範囲で、主成分が n=3 と特定されている場合 : n=3 に該当する構造を省略せずに描画してください。

- ③ 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 数を描画してください。

例)

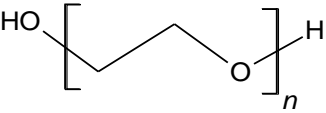

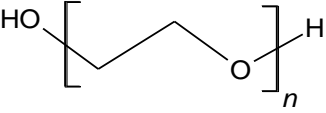

n=0 ~10 で申出 : n=0 に該当する構造を描画してください。

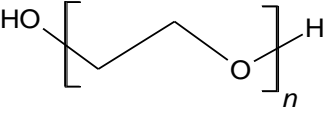
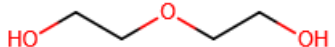
n=1 ~10 で申出 : n=1 に該当する構造を描画してください。

n=0 ~10 (ただし n=2, 3, 4 のいずれかが主成分) で申出 : n=2 に該当する構造を描画してください。

上記②及び③については、申出書の「主成分を記載」にチェックを入れてください。

例) ポリオキシエチレン

申し出たい物質	描画する構造式
 <p>n = 3 のみ</p>	 <p>n = 3 の構造式を描画</p>
 <p>n = 2 ~ 10、主成分は n = 3</p>	 <p>主成分である n = 3 の構造式を描画 <u>申出書の「主成分を記載」にチェック</u></p>

 <p>n = 2 ~ 10、主成分不明</p>	 <p>分子量が最小となる n = 2 の構造式を描画 申出書の「主成分を記載」にチェック</p>
---	---

Q-6：無機化合物において、分子式が作成可能であるものの実際に描画することが困難な化学物質（「リンタングステン酸」等）は、どのように描画するのか？

A-6：

ガイダンス 2.3.3 図表 2.4 (p.6) に従い、構成元素を併記してください。

Q-7：メタロセン錯体の配位子であるシクロペンタジエンのようにアニオン中心が特定できない化合物は、どのように描画するのか？

A-7：

イオン性を有する化合物はガイダンス 3.1 及び 3.3 (p.11,12) に従い描画してください。イオン中心が特定できない場合は、最も可能性が高い位置にアニオン中心を配置した構造を描画していただいて構いません。

Q-8：水和物の水は描画しないとガイダンスに記載があるが、水を描画しないといけないケースはあるのか？

A-8：

水を描画しないケースは「水和物の場合のみ」です。

水和物以外の場合（例：加水分解生成物の原料としての水、配位子としての水等）は描画する必要があります。

高分子化合物の描画について

Q-9 : ガイダンスにおける「高分子化合物」の定義は何か？

A-9 :

ガイダンス 2.1 (p.2) 図表 2.1 では「1種類以上の単量体単位の連鎖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%未満であり、数平均分子量が1,000以上の化合物」と定義しています。高分子化合物は、原則として、単量体の構造式を描画してください。あわせて申出書の「高分子化合物の記載」にチェックを入れてください。

上記の定義を満たす高分子化合物であっても、多段階反応により得られる複雑な高分子化合物である場合等、単量体の構造式を描画できない場合には、ガイダンス 2.3.5 (p.9)「原料を描画する場合」に従い描画してください。この場合、申出書の「高分子化合物の記載」にはチェックを入れず、「原料の記載」にチェックを入れてください。

なお、繰り返し構造を持っていたとしても、数平均分子量の範囲の下限値が1,000未満の場合は、ガイダンス 2.3.4 (p.7)「主成分を描画する場合」及びQ-5に従い描画してください。この場合、申出書の「高分子化合物の記載」にはチェックを入れず、「主成分を記載」にチェックを入れてください。また、主要な構成成分の構造が同定できない場合は、ガイダンス 2.3.5 (p.9)「原料を描画する場合」に従い描画してください。この場合、申出書の「原料の記載」にチェックを入れてください。

Q-10: 申し出たい物質が、高分子化合物を原料とする反応生成物（「(A・B共重合物)とCの反応生成物」等)である場合、どのように描画するのか?

A-10:

ガイダンス 2.3.2 (p.5) に従い、隣接する単量体との結合部は反応基として描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」にチェックを入れてください。

例) スチレン・メタクリル酸共重合物とメタノールの反応生成物

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
① メタクリル酸が 100%エステル化する場合	
エステル化したメタクリル酸 (メタクリル酸メチル) を単量体のひとつとして描画します。	
② エステル化しないメタクリル酸が残存する場合	
エステル化したメタクリル酸 (メタクリル酸メチル) と未反応のメタクリル酸を単量体のひとつとして描画します。	

Q-11: 高分子化合物の描画において、単量体の構造に繰り返し成分を持つ場合、どのように描画するのか?

A-11:

Q-5と同様、ガイダンス 2.3.4 (p.7) 図表 2.5 のルールに従い、Q-5の①~③の基準で描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」及び「主成分を記載」にチェックを入れてください。

Q-12: 重縮合物等の単量体はどのように描画するのか?

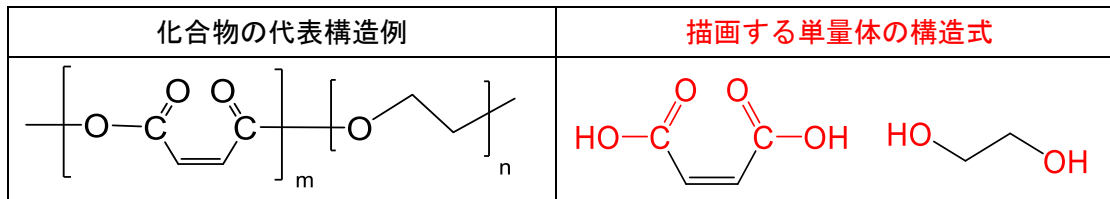
A-12:

ガイダンス 2.3.2 (p.5) 図表 2.3 に従い、各結合の反応点を考慮し、原則として単量体を描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」にチェックを入れてください。具体的な構造の描画方法は、以下をご参考にしてください。

・ポリエステル

単量体の反応点を-COOH（カルボキシ基）と-OH（ヒドロキシ基）として描画してください。

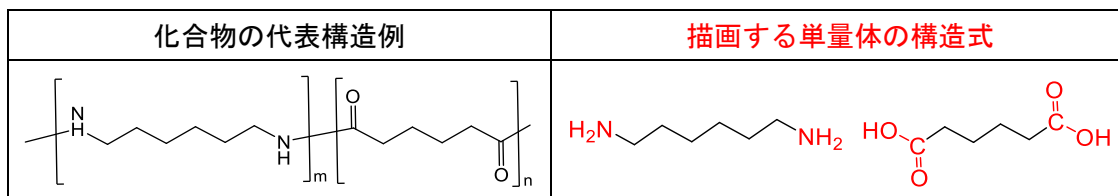
例) 無水マレイン酸とエチレングリコールの重縮合物



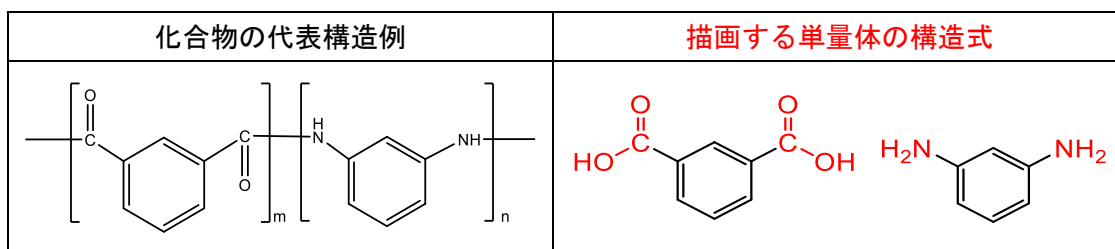
・ポリアミド

単量体の反応点を-NH₂（アミノ基）と-COOH（カルボキシ基）として描画してください。

例 1) ヘキサメチレンジアミンとアジピン酸の重縮合物



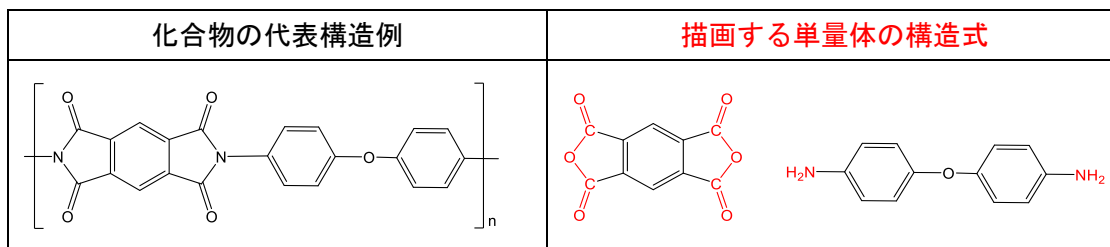
例 2) イソフタル酸ジクロライドと m-フェニレンジアミンの重縮合物



・ポリイミド

単量体の反応点を-CO-O-CO-（無水物の構造）と-NH₂（アミノ基）として描画してください。

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



・ポリウレタン

単量体の反応点を-OH（ヒドロキシ基）と-NCO（イソシアナト基）として描画してください。

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

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

単量体の反応点を-OH（ヒドロキシ基）とHO-CO-OH（炭酸）として描画してください。

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

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

単量体の反応点は-OH（ヒドロキシ基）として描画してください。

例) ジメチルシランジオール重縮合物

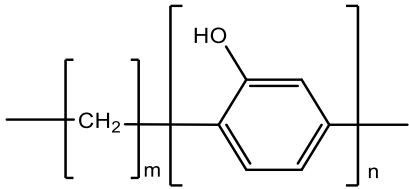
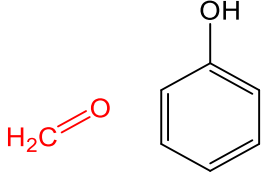
化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式

※反応点を描画できない構造は、以下をご参考にしてください。また、反応点について不明な高分子化合物がございましたら、個別に御相談ください。

・ホルムアルデヒド

メチレンによる架橋高分子化合物の場合、単量体として「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。この場合、申出書の「原料の記載」にチェックを入れる必要はありません。

例) ホルムアルデヒドとフェノールの重縮合物

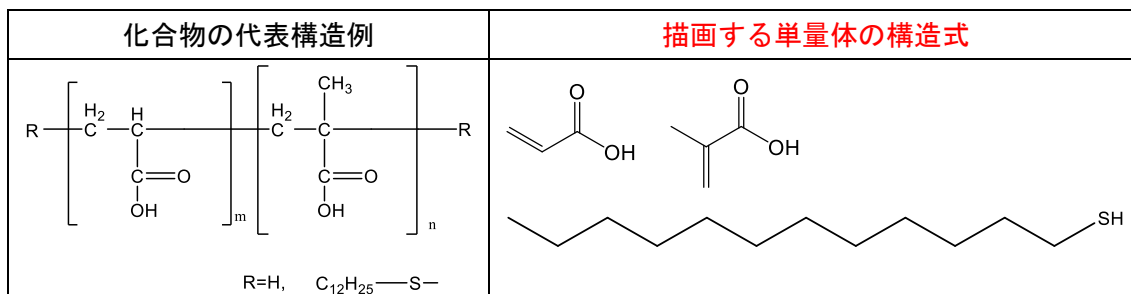
化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
	

Q-13: 高分子化合物を特定の原料を用いて末端を封止する場合、どのように描画するのか？

A-13:

ガイダンス 2.3.2 (p.5) に従い、高分子化合物の単量体及び末端を封止するために使用する原料を描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」にチェックを入れてください。末端を封止する原料を描画しますが、「原料の記載」にチェックを入れる必要はありません。

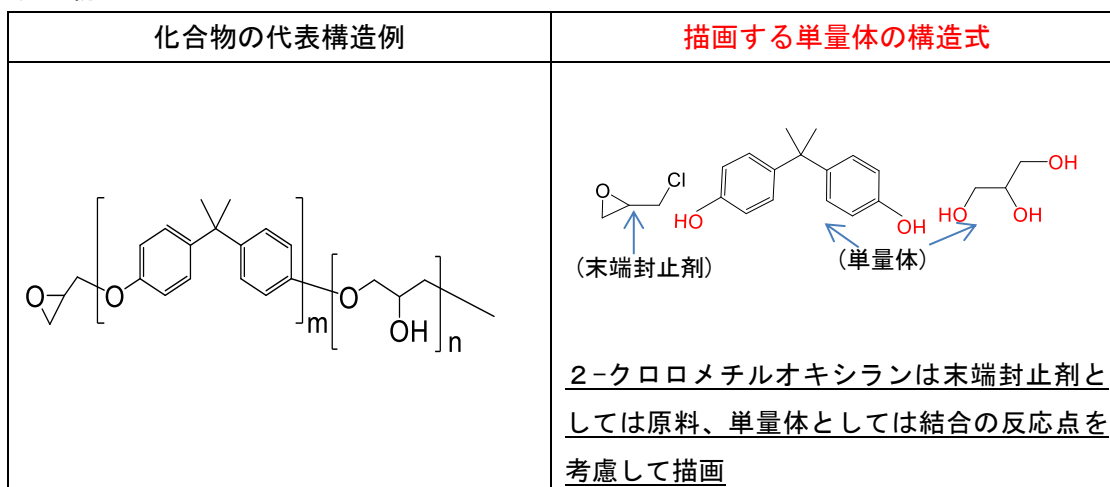
例) アクリル酸・メタクリル酸共重合物の末端をドデカン-1-チオールで封止した高分子化合物



「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の場合、単量体である「アクリル酸」、「メタクリル酸」及び末端を封止する原料である「ドデカン-1-チオール」を描画します。

繰り返し構造の単量体が末端を封止する原料としての役割も果たしている場合は、繰り返し構造としての単量体及び末端を封止する原料をどちらも描画してください。

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



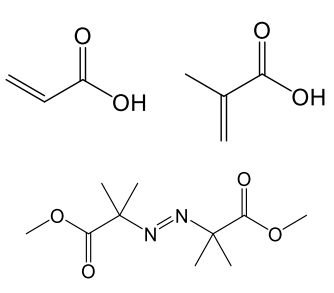
「2, 2-ビス(4'-ヒドロキシフェニル)プロパン」と「2-クロロメチルオキシラン」の反応において、「2-クロロメチルオキシラン」が繰り返し構造及び末端構造の両方に寄与する場合、単量体である「グリセリン」及び末端を封止する原料である「2-クロロメチルオキシラン」の構造を描画します。

Q-14: 高分子化合物について、申出名称に開始剤が含まれる場合、どのように描画するのか？

A-14:

ガイダンス 2.3.2 (p.5) に従い、高分子化合物の単量体及び開始剤を描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」にチェックを入れてください。開始剤を描画しますが、「原料の記載」にチェックを入れる必要はありません。

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体

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
$R \left[\begin{array}{c} H_2 \\ \\ C \\ \\ H \\ \\ C=O \\ \\ OH \end{array} \right]_m \left[\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ H_2 \\ \\ C \\ \\ C=O \\ \\ OH \end{array} \right]_n R$ <p style="text-align: center;">R=H, $H_3C-O-C(=O)-C(CH_3)_2$</p>	

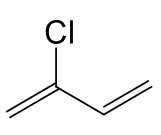
単量体である「アクリル酸」、「メタクリル酸」及び開始剤の原料である「ジメチル=2, 2'-(ジアゼン-1, 2-ジイル)ビス(2-メチルプロパノアート)」を描画することになります。

Q-15: 高分子化合物を塩素化する場合、どのように描画するのか？

A-15:

塩素化後の高分子化合物の単量体を描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」にチェックを入れてください。

例) 1, 3-ブタジエン重合体の塩素化物

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
$\left[\begin{array}{c} H_2 \\ \\ C \\ \\ Cl \\ \\ H \\ \\ C \\ \\ H_2 \end{array} \right]_n$	

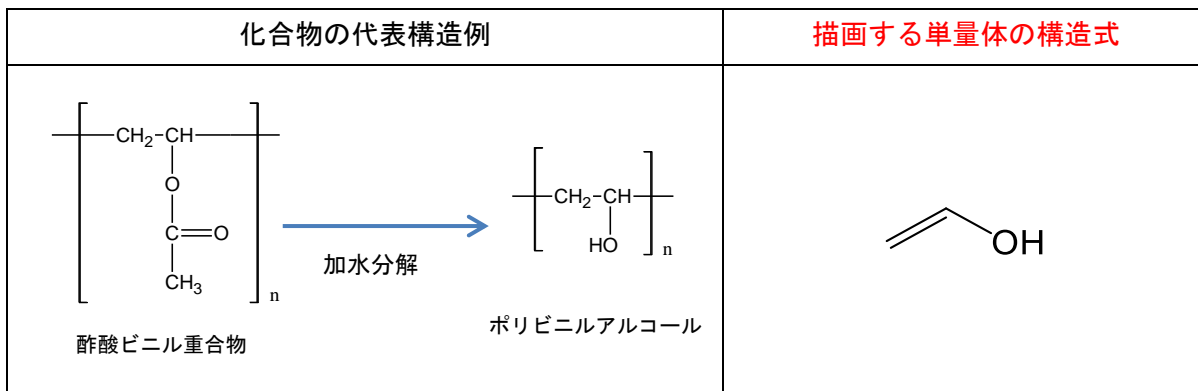
申し出たい高分子化合物の単量体である2-クロロ-1, 3-ブタジエンを描画することになります。原料の1, 3-ブタジエン重合体と塩素を分けて描画しないでください。

Q-16：高分子化合物を加水分解する場合、どのように描画するのか？

A-16：

加水分解後の高分子化合物の単量体を描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」にチェックを入れてください。

例) 酢酸ビニル重合体の加水分解反応生成物



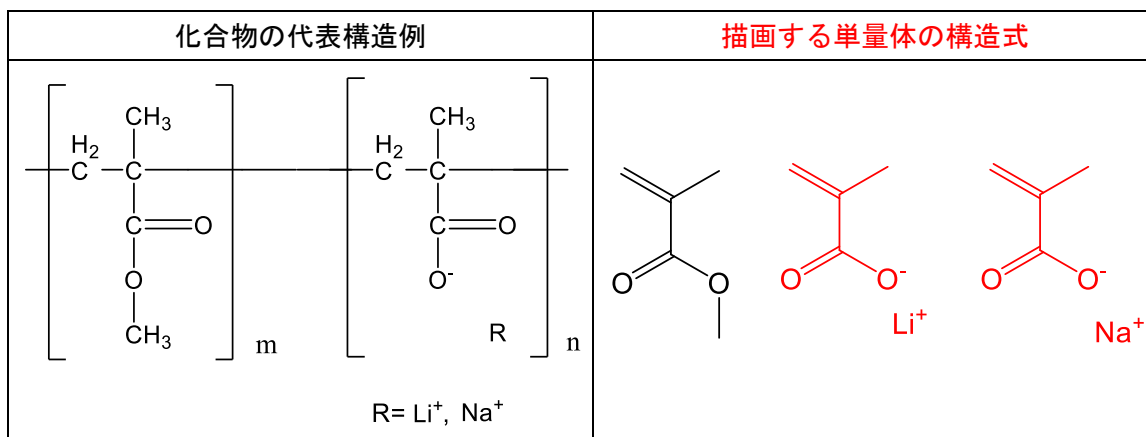
酢酸ビニル重合体を加水分解する場合、加水分解後の単量体である「ビニルアルコール」を描画します。原料の「酢酸ビニル」及び「水」を描画しないでください。

Q-17：高分子化合物において、カウンターイオンの種類が複数ある場合に、どのように描画するのか？

A-17：

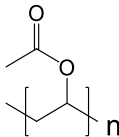
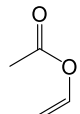
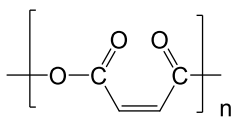
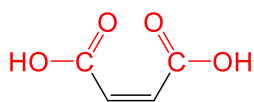
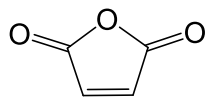
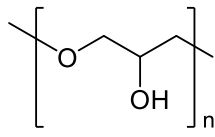
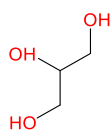
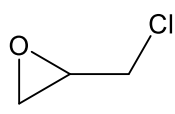
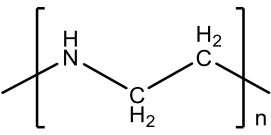
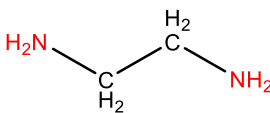
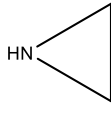
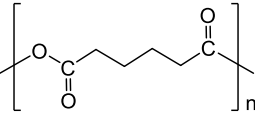
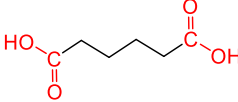
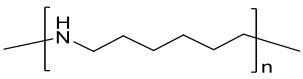
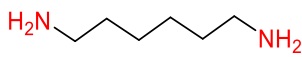
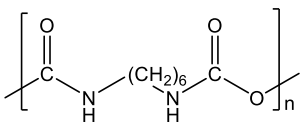
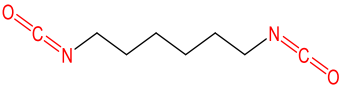
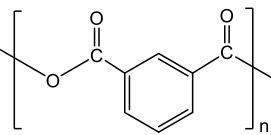
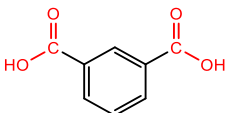
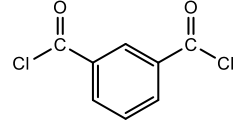
申し出たい物質が持つすべての種類の単量体を描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」にチェックを入れてください。

例) メタクリル酸メチル・メタクリル酸軽金属塩共重合物 (*軽金属：Li、Na)



「ナトリウムイオン」「リチウムイオン」と、それぞれに対応するアニオン（メタクリル酸由来アニオン）を2つ描画します。含有するイオンやアニオン成分を省略しないでください。

【参考】高分子化合物の単量体として描画する構造式及び主成分の構造が同定できない場合等に原料として描画する構造式の例

<p>申し出たい物質の 構造例</p>	<p>高分子化合物の単量体 として描画する構造式</p>	<p>原料として描画する構造式 (例) (高分子化合物の単量体又は主成分 が同定できない場合に限る。)</p>
		<p>同左 酢酸ビニル</p>
		 <p>無水マレイン酸</p>
		 <p>エピクロロヒドリン</p>
		 <p>エチレンイミン</p>
		<p>同左 アジピン酸</p>
		<p>同左 ヘキサメチレンジアミン</p>
		<p>同左 ヘキサメチレンジイソシアネート</p>
		 <p>イソフタル酸ジクロライド</p>