

少量新規化学物質の構造式ファイル作成に関する F A Q

第 1.4 版

令和 5 年 4 月 3 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化学物質同定課

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）
2020/11/25	Ver.1.2 公開（QA の番号の振り方を変更、Q-1-1、Q-1-4 を追加、Q-1-8、Q-2-4 に具体例を追記、Q-2-2 に説明を追記等）
2022/1/11	Ver.1.3 公開（Q-1-5 の修正、Q-1-8 に軽微な文言修正、Q-1-12 を追加、Q-2-7 に具体例を追記等）
2023/4/3	Ver.1.4 公開（Q1-1、Q1-3、Q1-5、に軽微な文言修正、Q-2-1 に具体例、Q-2-4 に参考を追記、Q-2-10 を追加）

目次

単一成分等の描画について	5
Q-1-1: 申し出たい物質が、個別成分毎に申出できない新規化学物質と既存化学物質の混合物である場合、どの構造式を描画するのか?	6
Q-1-2: 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?	7
Q-1-3: 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?	7
Q-1-4: 申し出たい物質が、個別成分毎に申出できない反応生成物であって、既存化学物質を含む場合、どの構造式を描画するのか?	8
Q-1-5: 申し出たい物質が、立体異性体混合物の場合、どの構造式を描画するのか?	10
Q-1-6: 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?	10
Q-1-7: 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?	10
Q-1-8: 無機化合物において、実際に構造式を描画することが困難な化学物質（「リンタンゲステン酸」「二酸化ケイ素（シリカゲル等を含む）」等）は、どのように描画するのか?	11
Q-1-9: 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?	12
Q-1-10: 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?	12
Q-1-11: フラーレン及びタンパク質等は、どのように描画するのか?	12
Q-1-12: 天然の脂肪酸等に由来する、飽和及び不飽和の炭化水素鎖の主成分が不明でかつ構造が明確でない場合、描画する炭化水素の構造は何か?	12
高分子化合物の描画について	14
Q-2-1: ガイダンスにおける「高分子化合物」の定義は何か?	15
Q-2-2: 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?	16
Q-2-3: 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?	16
Q-2-4: 重縮合物等の単量体はどのように描画するのか?	16
Q-2-5: 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?	23
Q-2-6: 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?	24
Q-2-7: 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?	24
Q-2-8: 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?	25
Q-2-9: 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?	26
Q-2-10: 高分子化合物において、原料に置換位置の違いによる異性体が含まれる場合、どのように描画するのか?	26

【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.....	28
--	----

単一成分等の描画について

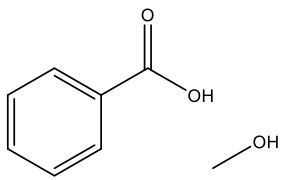
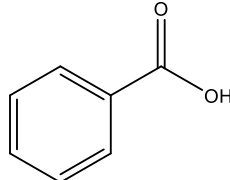
Q－１－１：申し出たい物質が、個別成分毎に申出できない新規化学物質と既存化学物質の混合物である場合、どの構造式を描画するのか？

A－１－１：

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 図表 2.5 の判断フローに従い、同定可能な新規化学物質の構成成分を描画してください。既存化学物質の含有率の方が新規化学物質の含有率より大きい場合であっても、新規化学物質の構造式を描画していただくことになります。

申出物質が新規化学物質と既存化学物質の混合物であって、新規化学物質が複数含まれる場合も、図表 2.5 の判断フローに従い、同定可能な新規化学物質の構成成分を描画してください。また、いずれの場合も申出書の「主成分を記載」を「１（有）」にしてください。

例）安息香酸（新規化学物質とする）とメタノール（既存化学物質とする）の混合物

申し出たい物質	描画する構造式
	

Q－１－２：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？

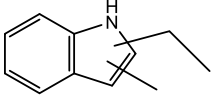
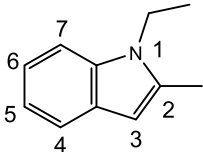
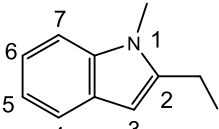
A－１－２：

ガイダンス 2.3.4 図表 2.6「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 図表 2.6「含有率が不明確な場合」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」を「１（有）」にしてください。

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
	 ×  ○

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－１－３：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？

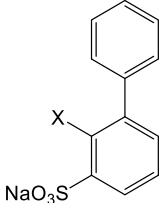
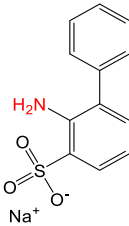
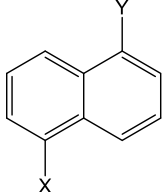
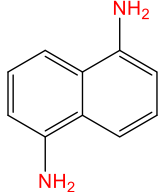
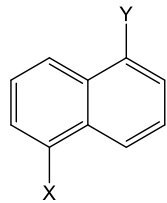
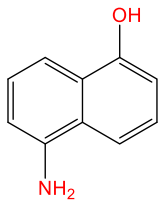
A－１－３：

ガイダンス 2.3.4 図表 2.6 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、以下をご参考になしてください。

- 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 2.6 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 2.6 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」を「１（有）」にしてください。

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	
 X=NH₂ or OH	
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	
 X= NH₂ or OH Y= NH₂ or OH	
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	
 X= NH₂ or OH Y= NH₂ or OH X、Yのうち少なくとも1つがOH	
-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。	

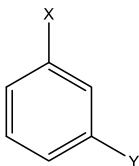
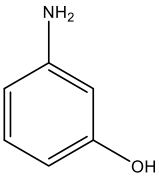
Q－１－４：申し出たい物質が、個別成分毎に申出できない反応生成物であって、既存化学物質を含む場合、どの構造式を描画するのか？

A－１－４：

ガイダンス 2.3.4 図表 2.6 のルールに従い、新規化学物質のうち、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、図表 2.6 のルール及び図表 2.7 のルールに従い、同定可能な新規化学物質の構成成分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」を「1（有）」にしてください。

例）反応生成物のうち、主な構造は判明しているものの、X=Y=NH₂ のみが既存化学物質、それ以外の成分は新規化学物質であり、各成分の含有率は不明である場合

申し出たい物質	描画する構造式
 X = NH₂ or OH Y = NH₂ or OH	
X=Y=NH₂ でないという条件を満たし、かつ、分子量のより小さい構造式 (–NH₂ (アミノ基) を1つ、–OH (ヒドロキシ基) を1つ有する構造式) を描画します。	

Q－１－５：申し出たい物質が、立体異性体混合物の場合、どの構造式を描画するのか？

A－１－５：

少量新規化学物質の申出に対する数量調整及び確認では、立体異性体は区別しません（同一の物質として取り扱います。）ので、立体異性体の混合物であっても単一の成分として、立体異性体を区別しない構造式を採用して構造式ファイルを作成してください。

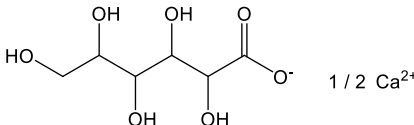
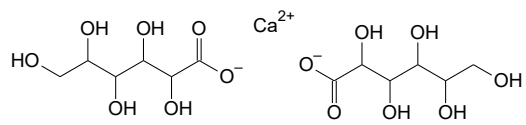
具体的には、ガイダンス 3.4 もしくは「少量新規化学物質の申出手続」の別添 3 をご参照ください。

Q－１－６：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－１－６：

イオン結合を有する塩はガイダンス 3.1 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
	

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－１－７：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－１－７：

ガイダンス 2.3.4 図表 2.6 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)

$n = 0 \sim 10$ 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)

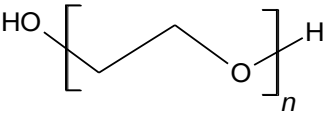
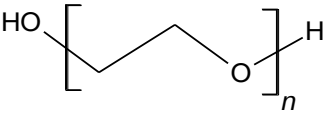
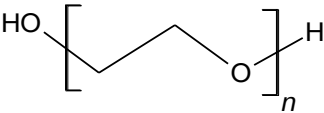
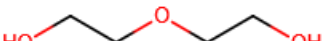
$n = 0 \sim 10$ で申出： $n = 0$ に該当する構造を描画してください。

$n = 1 \sim 10$ で申出： $n = 1$ に該当する構造を描画してください。

$n = 0 \sim 10$ (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」を「1 (有)」にしてください。

例) ポリオキシエチレン

申し出たい物質	描画する構造式
 $n = 3$ のみ	 $n = 3$ の構造式を描画
 $n = 2 \sim 10$ 、主成分は $n = 3$	 主成分である $n = 3$ の構造式を描画 申出書の「主成分を記載」は「1 (有)」
 $n = 2 \sim 10$ 、主成分不明	 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」は「1 (有)」

Q-1-8：無機化合物において、実際に構造式を描画することが困難な化学物質（「リンタングステン酸」「二酸化ケイ素（シリカゲル等を含む）」等）は、どのように描画するのか？

A-1-8：

ガイダンス 2.3.3 図表 2.4 に従い、構成元素を併記してください。

なお、二酸化ケイ素については、ガイダンス 2.3.5 に従い原料を描画する場合のみ構成元素を併記してください。ガイダンス 2.3.2 図表 2.3 に従い単量体を描画する場合は、Q-2-4 ポリシロキサン の事例に従ってください。

Q-1-9：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-1-9：

イオン性を有する化合物はガイダンス 3.1 及び 3.3 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-1-10：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-1-10：

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。

Q-1-11：フラレン及びタンパク質等は、どのように描画するのか？

A-1-11：

フラレン及びタンパク質等を含む構造についてはガイダンス 2.3.6 に従いグループ⑥として構造の推測に参考となる情報を添付・入力してお申し出ください。

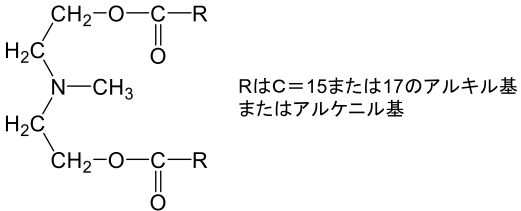
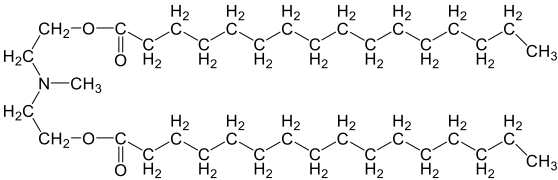
この際、ガイダンスにも記載があるとおり、申出書の「高分子化合物の記載」「主成分を記載」「原料の記載」は全て「2（無）」にしてください。

Q-1-12：天然の脂肪酸等に由来する、飽和及び不飽和の炭化水素鎖の主成分が不明でかつ構造が明確でない場合、描画する炭化水素の構造は何か？

A-1-12：

飽和及び不飽和の炭化水素鎖が混在し、炭化水素鎖部分の主成分が不明でかつ構造が明確でない場合、描画する炭化水素鎖部分は飽和炭化水素鎖のうち分子量が最小の構造としてください。

例) 2, 2' - (メチルイミノ) ジ (エタン-1-オール) と脂肪酸 (C=16~18 のアルキル又はアルケニル) とのエステル

化合物の代表構造例	描画する構造式
 RIはC=15または17のアルキル基 またはアルケニル基	

脂肪酸由来の炭化水素鎖部分は、考えられる飽和炭素鎖のうち、分子量が最小となるヘキサデカン酸 (C=16) 由来の構造となります。

高分子化合物の描画について

Q-2-1: ガイダンスにおける「高分子化合物」の定義は何か？

A-2-1:

ガイダンス 2.1 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」を「1 (有)」にしてください。

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「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」を「2 (無)」にし、「原料の記載」を「1 (有)」にしてください。

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「主成分を描画する場合」及び Q-1-7 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」を「2 (無)」にし、「主成分を記載」を「1 (有)」にしてください。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「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」を「1 (有)」にしてください。

例) アクリロニトリル・ブタジエン共重合体の水素化物

申し出たい物質	描画する構造式

上の図中 n ユニットについて、反応点を二重結合として繰り返し単位の単量体を描画することが困難であるため、使用した原料を描画します。その場合、申出書の「原料の記載」を「1 (有)」にしてください。

なお、描画すべき構造に不明な点がある場合は個別に御相談ください¹。

¹ 化審法連絡システム 少量新規申出に関するお問合せ:

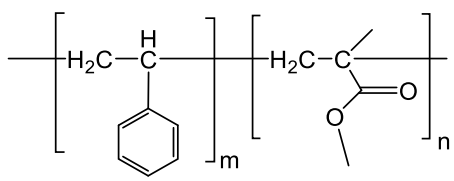
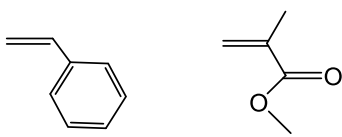
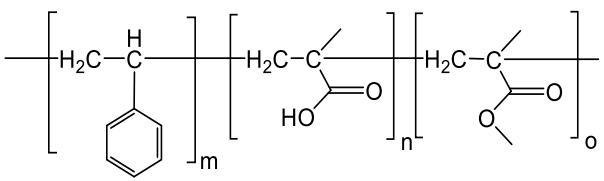
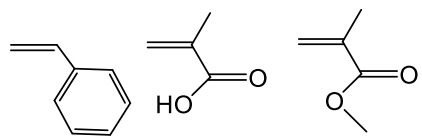
<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/kasinnrenraku/syouryou/syouryouForm.html>

Q－2－2：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－2－2：

ガイダンス 2.3.2 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。また、単量体は反応後の構造を基に描画してください。あわせて、申出書の「高分子化合物の記載」を「1（有）」にしてください。

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）ユニットと未反応のメタクリル酸ユニットの両方が必ず存在する場合は、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それぞれを単量体のひとつとして描画します。	

Q－2－3：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－2－3：

Q－1－7と同様、ガイダンス 2.3.4 図表 2.6 のルールに従い、Q－1－7 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」を「1（有）」にしてください。

Q－2－4：重縮合物等の単量体はどのように描画するのか？

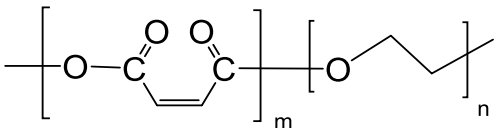
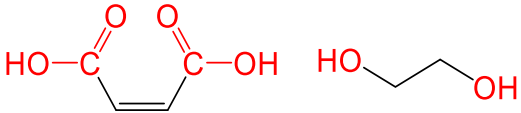
A－2－4：

ガイドンス 2.3.2 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」を「1（有）」にしてください。
具体的な構造の描画方法は、以下をご参考になしてください。

・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。

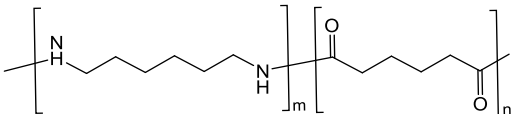
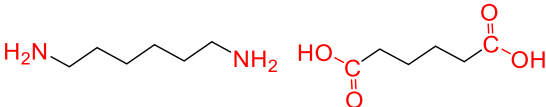
例) 無水マレイン酸とエチレングリコールの重縮合物

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
	

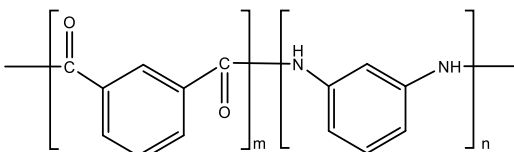
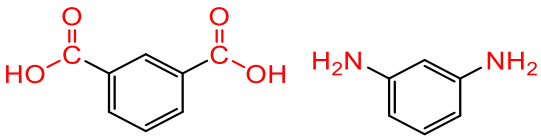
・ポリアミド

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

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
	

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

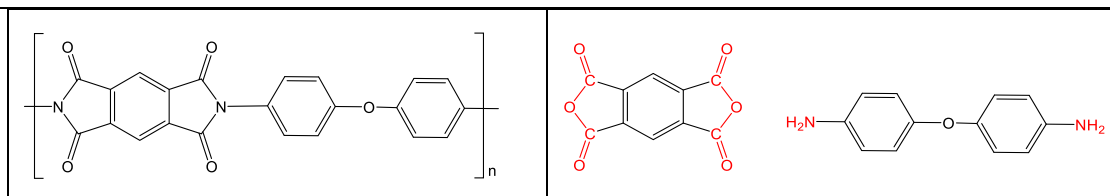
化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
	

・ポリイミド

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

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
-----------	-------------



【参考】

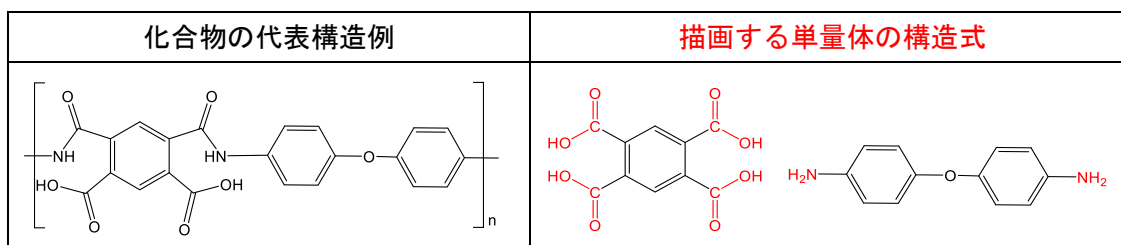
カルボン酸二無水物とジアミンの重合反応について、「重付加物」であるか「重縮合物」であるかで、描画すべき構造が変わります。

「重付加物」である場合は、カルボン酸二無水物部分が開環して重合します。従いまして、描画する単量体の構造式は開環構造になります。

「重縮合物」である場合は、①カルボン酸二無水物部分が閉環したまま重合するか、もしくは②カルボン酸二無水物部分が閉環したまま重合する構造と開環して重合する構造の両方を含む場合があります。どちらのケースであるかは実態に併せてご判断ください。従いまして、描画する単量体の構造式は、①の場合は閉環構造のみ、②の場合は閉環構造と開環構造を両方描画することになります。

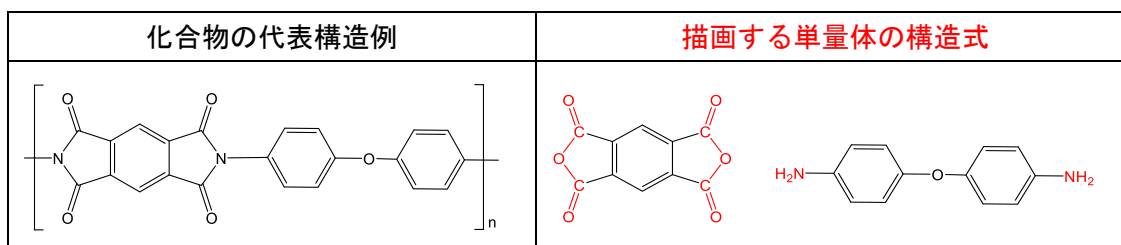
実態を確認の上、申出名称と構造式で齟齬が出ないように描画してください。

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付加物

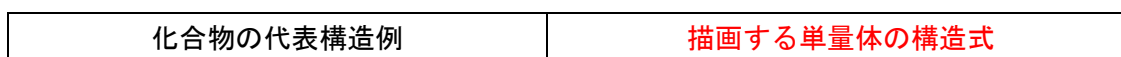


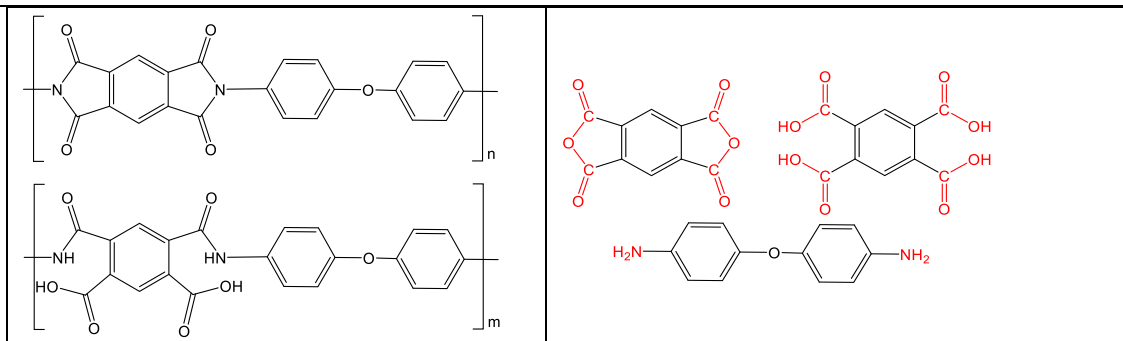
例) ベンゼン-1, 2, 4, 5-テトラカルボン酸二無水物と4, 4'-ジアミノジフェニルエーテルの重縮合物

①カルボン酸二無水物部分が閉環したまま重合する場合



②カルボン酸二無水物部分が閉環したまま重合する構造と開環して重合する構造の両方を含む場合

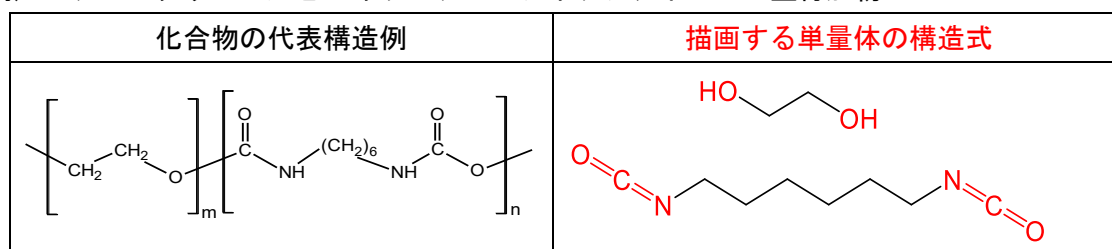




・ポリウレタン

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。

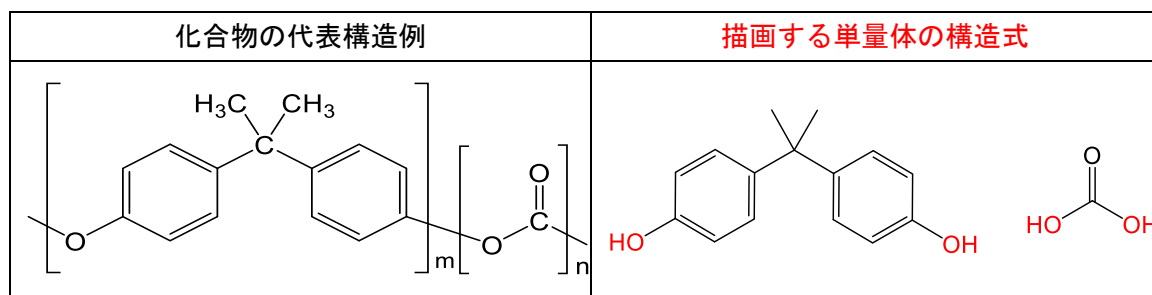
例）エチレングリコールとヘキサメチレンジイソシアネートの重付加物



・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。

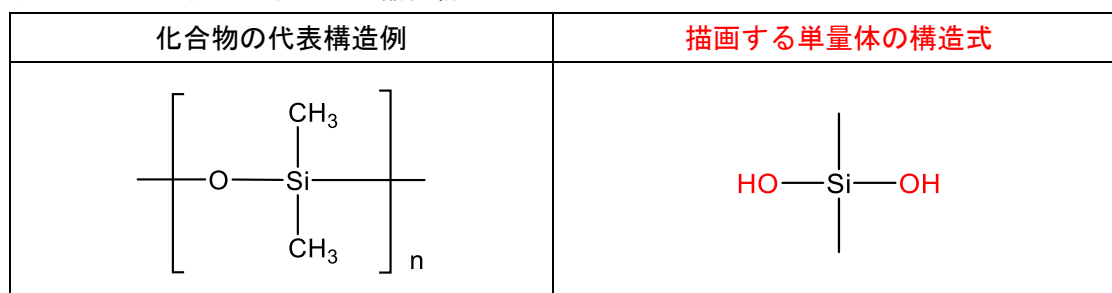
例）2，2ービス（4'ーヒドロキシフェニル）プロパンとホスゲンの重縮合物



・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。

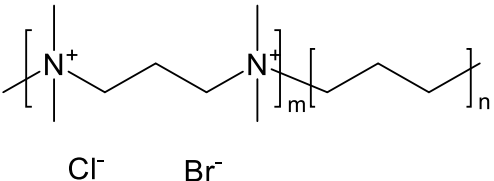
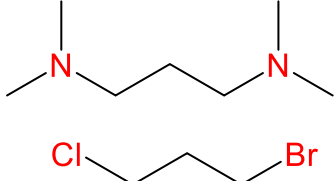
例）ジメチルシランジオール重縮合物



※反応点を描画できない構造は、以下をご参考になしてください。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¹。

- ・アミンとハロゲンの反応により第四級アンモニウム塩を形成するポリマー
単量体の反応点をアミンとハロゲンとして描画してください。

例) N, N, N', N' - テトラメチルプロピレンジアミンとブromokloropropan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
	

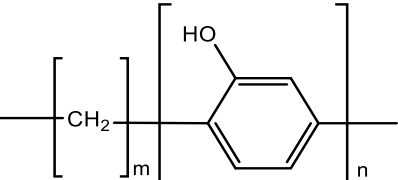
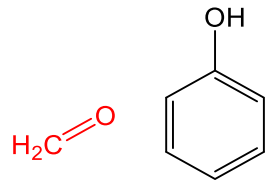
- ・フェノール樹脂等のメチレンによる架橋ポリマー

①無置換のメチレンによる架橋ポリマー

メチレンによる架橋高分子化合物の場合、繰り返し単位のメチレン部分は単量体として「ホルムアルデヒド」を描画し、ホルムアルデヒドにより架橋される繰り返し単位は反応点を描画せず単量体を描画してください。

この場合、ホルムアルデヒドは原料ではなく繰り返し単位の単量体として描画しているため、申出書の「高分子化合物の記載」を「1 (有)」にしてください。

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
	

② 置換基が結合したメチレンによる架橋ポリマー

「①無置換のメチレンによる架橋ポリマー」と同様に、繰り返し単位の単量体としてはホルムアルデヒドの水素を置換基で置き換えた構造を描画してください。

この場合、ホルムアルデヒドは原料ではなく繰り返し単位の単量体として描画しているため、申出書の「高分子化合物の記載」を「1 (有)」にしてください。

例) 2-tert-ブチル-4-メチルフェノール・2-tert-ブチル-5-メチルフェノール・4-ヒドロキシベンズアルデヒド重縮合物

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式

メチレンによる架橋部分に4-ヒドロキシベンゼンが置換した構造であるため、繰り返し単位の単量体としては4-ヒドロキシベンズアルデヒドを描画してください。

・反応点の描画が困難な導電性ポリマー

ポリチオフェン等の反応点の描画が困難な導電性ポリマーの場合、反応点は描画せず、単量体を描画してください。この場合、申出書の「原料の記載」を「2（無）」にしてください。

例) ポリチオフェン

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式

ただし、ポリアニリンについては、「ベンゼン-1, 4-ジアミン」及び「シクロヘキサ-2, 5-ジエン-1, 4-ジイミン」を単量体として描画してください。

例) ポリアニリン

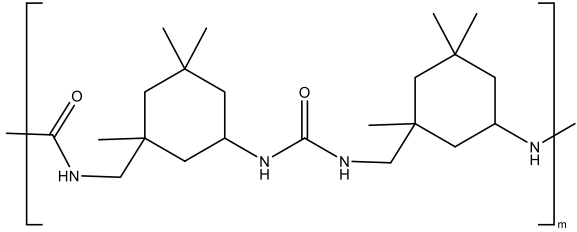
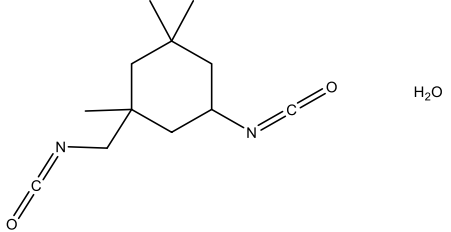
化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式

・水重縮合物

イソシアネート単量体に水を反応させて重合し、尿素結合を形成しているポリマーの場合、単量体としては水及びイソシアネート単量体を描画してください。あわせて、「高分子化合物

の記載」を「1（有）」にしてください。この場合の水は繰り返し単位とみなしますので「原料の記載」は「2（無）」にしてください。

例) イソホロンジイソシアネートと水の重縮合物

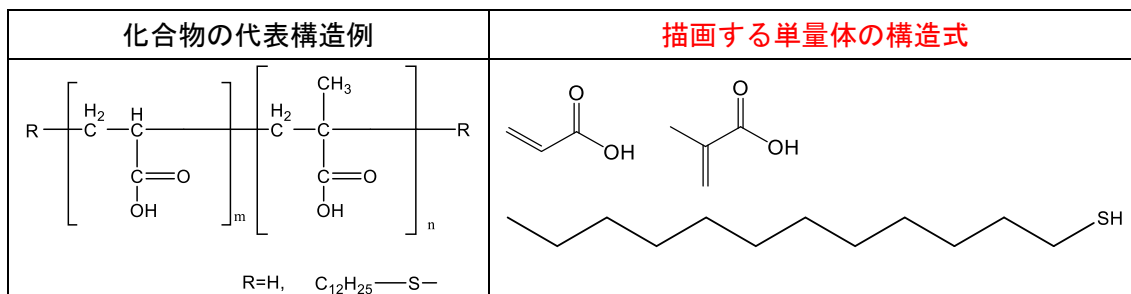
化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
	

Q－２－５：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－２－５：

ガイダンス 2.3.2 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」を「１（有）」にしてください。末端を封止する原料を描画しますが、「原料の記載」を「２（無）」にしてください。

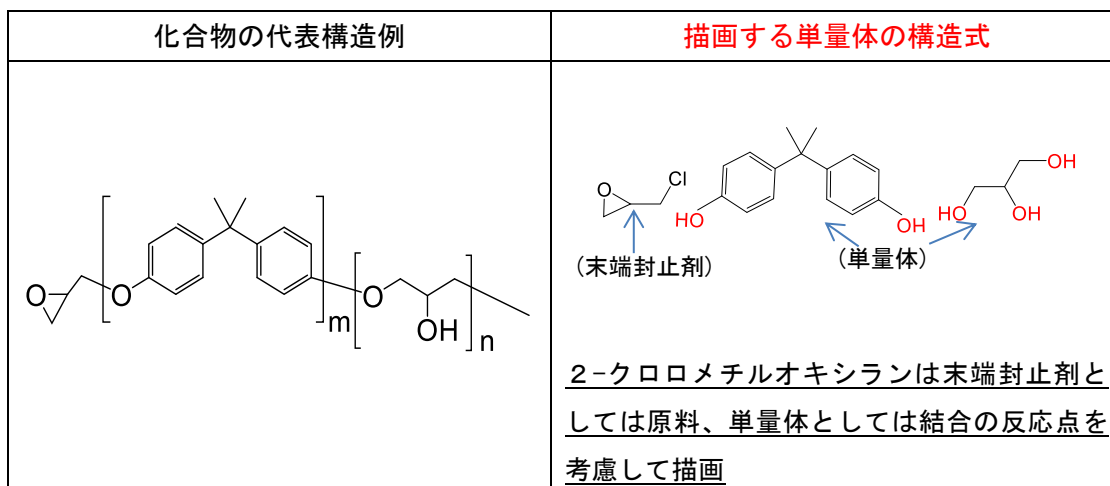
例）アクリル酸・メタクリル酸共重合物の末端をドデカン－１－チオールで封止した高分子化合物



「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。なお、繰り返し構造としての単量体及び末端を封止する原料として描画すべき構造が同じ構造となる場合、２つ描画せず、１つのみ描画してください。

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-2-6：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-2-6：

ガイダンス 2.3.2 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」を「1（有）」にしてください。開始剤を描画しますが、「原料の記載」を「2（無）」にしてください。

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

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式

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-2-7：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？

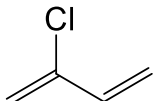
A-2-7：

塩素化の進行度によって、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」を「1（有）」にしてください。

例）1，3－ブタジエン重合物の塩素化物

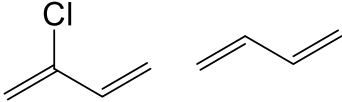
<完全塩素化物（塩素化され得る場所が完全に塩素化している）の場合>

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
-----------	-------------

$\left[\begin{array}{c} \text{H}_2 \\ \\ \text{---C---} \end{array} \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{=C---} \end{array} \begin{array}{c} \text{H}_2 \\ \\ \text{---C---} \end{array} \right]_n$	
---	---

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。

＜部分塩素化物（塩素化され得る場所が一部塩素化されている）の場合＞

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
$\left[\begin{array}{c} \text{H}_2 \\ \\ \text{---C---} \end{array} \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{=C---} \end{array} \begin{array}{c} \text{H}_2 \\ \\ \text{---C---} \end{array} \right]_m \left[\begin{array}{c} \text{H}_2 \\ \\ \text{---C---} \end{array} \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{=C---} \end{array} \begin{array}{c} \text{H}_2 \\ \\ \text{---C---} \end{array} \right]_n$	

申し出たい高分子化合物の単量体である 2-クロロ-1, 3-ブタジエン及び 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。

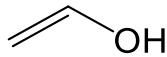
Q-2-8：高分子化合物を加水分解する場合、どのように描画するのか？

A-2-8：

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」を「1（有）」にしてください。

例）酢酸ビニル重合体の加水分解反応生成物

＜完全加水分解物の場合＞

化合物の代表構造例	描画する単量体の構造式
$\left[\begin{array}{c} \text{---CH}_2\text{---CH---} \\ \\ \text{O} \\ \\ \text{C=O} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \right]_n$ 酢酸ビニル重合体 加水分解 $\left[\begin{array}{c} \text{---CH}_2\text{---CH---} \\ \\ \text{HO} \end{array} \right]_n$ ポリビニルアルコール	

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。

＜部分加水分解物の場合＞

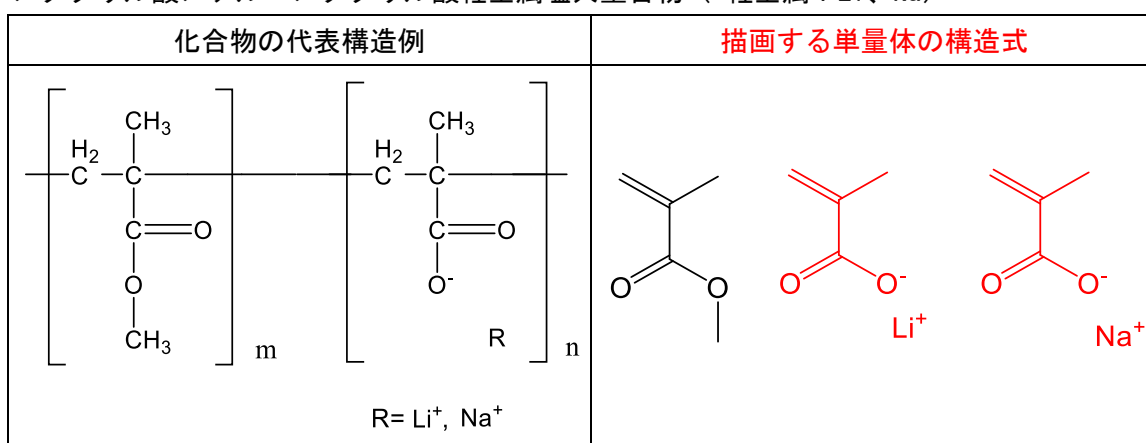
Q－2－7に記載の部分塩素化物の例を参考に、申し出たい高分子化合物の単量体を描画してください。

Q－2－9：高分子化合物において、カウンターの種類が複数ある場合、どのように描画するのか？

A－2－9：

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」を「1（有）」にしてください。

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）



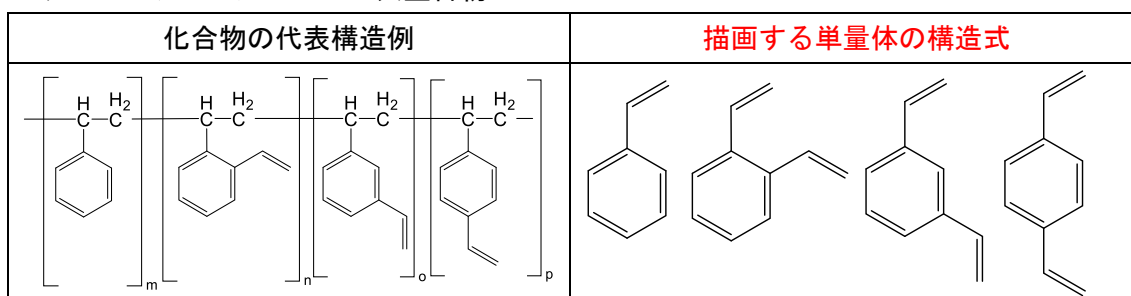
「ナトリウムイオン」「リチウムイオン」と、それぞれに対応するアニオン（メタクリル酸由来アニオン）を2つ描画します。含有するイオンやアニオン成分を省略しないでください。

Q－2－10：高分子化合物において、原料に置換位置の違いによる異性体が含まれる場合、どのように描画するのか？

A－2－10：

申し出たい物質に存在しうるすべての単量体を描画するのではなく、その物質に必ず含まれる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」を「1（有）」にしてください。

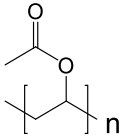
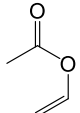
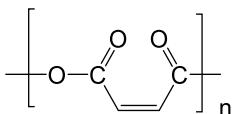
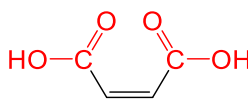
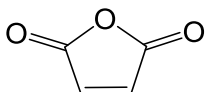
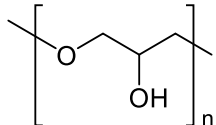
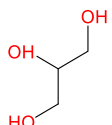
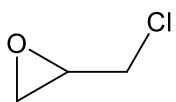
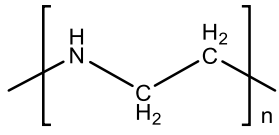
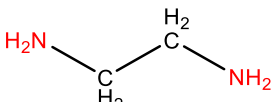
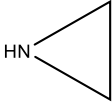
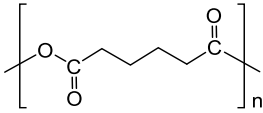
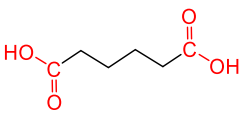
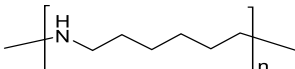
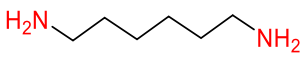
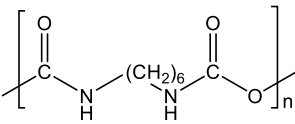
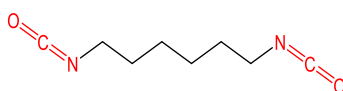
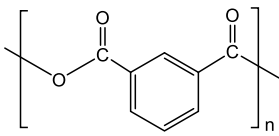
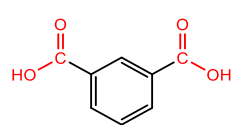
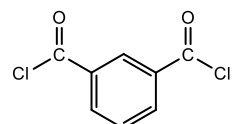
例）スチレン・ジビニルベンゼン共重合物



ジビニルベンゼンには、オルト、メタ、パラの 3 種類の置換位置の違いによる異性体があります。原料に 3 種類全ての異性体が必ず含まれるのであれば、3 種類全ての構造を描画してください。

なお、存在しうる異性体全ての構造を描画するのではなく、申し出たい物質の実態にあわせて、その物質に必ず含まれる異性体を描画してください。

【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

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