

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 1.8 版

令和 6 年 1 1 月 1 1 日

経済産業省産業保安・安全グループ
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

2018/7/30	Ver.1.0 公開
2018/10/02	Ver.1.1 公開 (図表 1.1、Marvin JS のダウンロード・利用先 URL を追記)
2019/9/25	Ver.1.2 公開 (図表 4.2 に事例追加、参考情報 5.1 追加等)
2020/11/25	Ver.1.3 公開 (2.3.4 に新規化学物質と既存化学物質の混合物である場合について追記等)
2022/1/11	Ver.1.4 公開 (図表 2.1 に軽微な文言修正、3.4.立体異性体を有する化合物の追加等)
2022/3/31	Ver.1.5 公開 (図表 2.1 に軽微な文言修正)
2022/5/31	Ver.1.6 公開 (図表 2.3、2.7 に軽微な修正)
2023/4/3	Ver.1.7 公開 (2.3.1、2.3.2、2.3.6、5.2 に軽微な文言修正)
2024/11/11	Ver.1.8 公開 (1、図表 1.1 に軽微な文言修正、情報更新等)

目次

1. 本ガイダンスの位置付け	1
2. 構造情報作成の流れ	2
2.1. 基本的な考え方	2
2.2. 構造選択にあたっての基本的なルール	3
2.3. 具体例	4
2.3.1. グループ①：単一成分を描画する場合	4
2.3.2. グループ②：単量体を描画する場合	5
2.3.3. グループ③：構成元素を描画する場合	7
2.3.4. グループ④：主成分を描画する場合	8
2.3.5. グループ⑤：原料を描画する場合	11
2.3.6. グループ⑥：構造の推測に参考となる情報を添付・入力する場合	12
3. 選択した構造を描画する際の共通ルール	13
3.1. イオン結合を有する化合物（塩など）	13
3.2. 水和物	14
3.3. 配位結合を有する化合物（キレート物質等）	15
3.4. 立体異性体を有する化合物	16
4. 描画における注意点	17
4.1. 描画ソフトでのテキスト追加機能の不使用のお願い	17
4.2. 不飽和環状化合物	19
5. 参考情報	20
5.1. 「高分子化合物の記載」等の選択について	20
5.2. 旧構造分類	21

1. 本ガイダンスの位置付け

平成 31 年度より、少量新規化学物質の申出には、電子データによる構造情報の提出が必要となりました。

本ガイダンスは、申出者の方向けに、少量新規化学物質の申出において、電子データで提出頂く構造情報を作成頂く際の、

- 構造情報を作成する対象の選択方法
- 選択した構造を描画する際のルール
- 描画における注意点

について説明する資料です。

なお、本ガイダンスを補足する資料として、よくある質問とその回答をとりまとめた「少量新規化学物質の構造式ファイル作成に関する F A Q¹」を別途公開しておりますので、当該 F A Q もご参照ください。

実際に『構造式ファイル』（MOL ファイル形式）（※1）を描画する際には、図表 1.1 のソフト又は NITE MOL ファイル作成システムを利用してください。下記以外を利用して描画した申出は、MOL ファイルからのコード化が適切にできないため、原則受け付けることができませんので、注意してください。

図表 1.1 申出手続きに利用可能な描画ソフト

描画ソフト	ChemDraw (有償／英語)	MarvinJS (※2) (有償／英語)	BIOVIA Draw (フリー／英語)
確認済み バージョン	ChemDraw Professional /Prime16, 17, 18, 19 ChemDraw Direct	23.15.1 (Neon.1)	2017 R2 2018
対応 OS	Windows / Mac OS	ウェブベースアプリ (Windows、Linux、 Mac OS)	Windows のみ
マニュアル	あり (日本語)	あり (英語)	あり (日本語)
開発元	Revvity Signals Software	Chemaxon	Dassault Systems
入手・利用先			

※1 出力する MOL ファイル形式のバージョンは V3000 又は V2000 (MarvinJS は V3000 のみ) をご利用ください。

※2 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律第 3 条第 1 項第 5 号に基づく少量新規化学物質の申出書類の作成に利用されることを目的に、MarvinJS を用いた「NITE MOL ファイル作成システム」（日本語マニュアルあり）を無償にて提供しております。

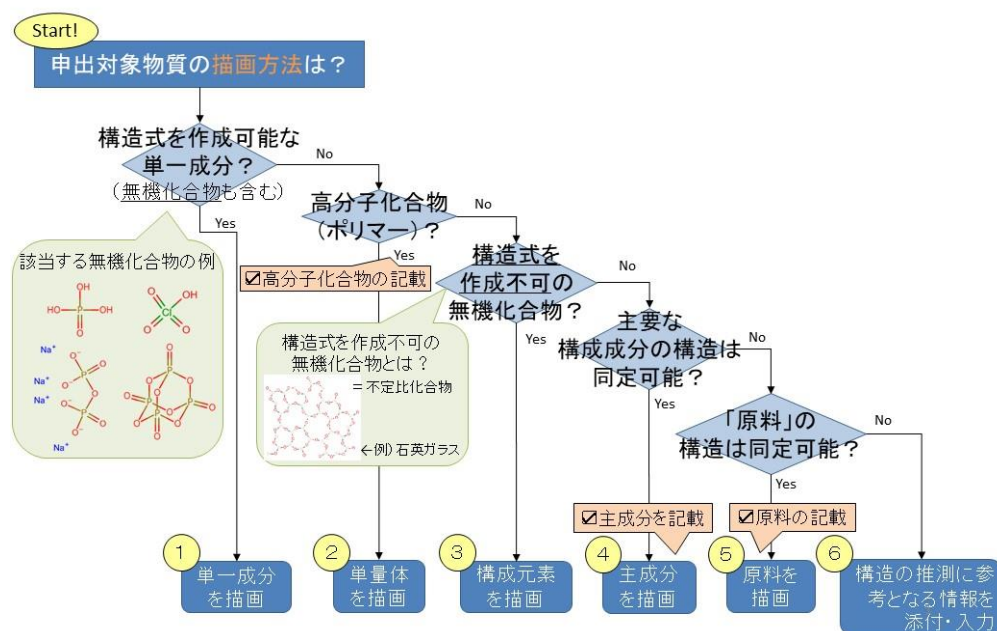
➤ NITE MOL ファイル作成システム 

¹ 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 : <https://www.nite.go.jp/data/000100456.pdf>

2. 構造情報作成の流れ

2.1. 基本的な考え方

申出者は、申出対象物質ごとに図表 2.1 の判断フローに基づいて描画すべき対象を判断してください。図表 2.1 の判断フローに従って、「高分子化合物の記載」、「主成分を記載」、「原料の記載」に該当する場合は、少量新規化学物質の申出書の電算処理コード「①高分子化合物の記載」、「②主成分を記載」、「③原料の記載」を「1（有）」にしてください。申出システムを利用する場合は「申出書データ入力」画面の当該チェックボックスにチェックをしてください（詳細は 5.1 節参照）。正しく記載されていない場合、化学構造が正しく認識されず、申出対象物質の申出がなされたものとして扱われない可能性があるので注意してください。



《用語の定義》

- 構造式: 化合物を構成している各原子が分子内でどのように結合し合っているかを、図式的に書き表した化学式。
- 単一成分: 1つの構造式からなる化合物(中和している塩類は単一成分と見なす)。
- 高分子化合物: 以下の①及び②に該当するもの。
 - ① 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%未満であること。
 - ② 数平均分子量が1,000以上であること。
- 無機化合物: 有機化合物でないもの。
- 有機化合物: i) ~ iii) のいずれかに該当する化合物; i) C - C間の共有結合あり、ii) C - H間 or C - X(ハロゲン)間の共有結合あり、iii) C - N間の一重 or 二重結合あり。
- 同定可能: i) かつii)、又はi) かつiii) の場合; i) 構造式で表現可能、ii) 異性体を特定可能、iii) (置換基がある場合) 同一の基本骨格に特定可能な置換基が修飾。
(ii) の例: o-, m-, p-等、iii) の例: “R-”等の複数の(既知の)置換基をもつ共通主骨格構造)

図表 2.1 描画すべき構造の選択に係る判断フロー

2.2. 構造選択にあたっての基本的なルール

混合物等の申出にあたっては、個別成分ごとに申し出て頂くことが必要となります。個別成分ごとに申し出て頂けない場合は、申出書類の再作成をお願いすることがあります。

なお、多成分から成る反応生成物については、以下の手順に従い、描画するグループを選択してください。

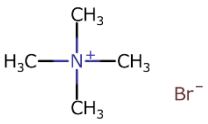
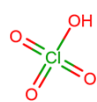
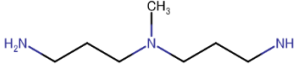
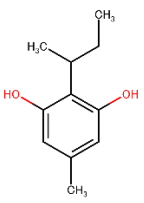
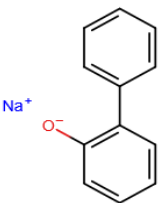
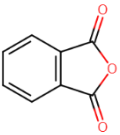
- ・ 反応生成物に関して、含有率が最も大きい成分（主成分）の構造を特定できる場合
→グループ④の主成分を描画する場合に該当（含有率が最も大きい成分を主成分として描画）
- ・ 反応生成物に関して、含有率が最も大きい成分（主成分）の構造は特定できないが、個別成分の構造は特定できる場合
→グループ④の主成分を描画する場合に該当（含有率が不明確な場合のルールに従い、描画する構造式を選択）
- ・ 反応生成物に関して、個別成分の構造が全く特定できない場合
→グループ⑤の原料を描画する場合に該当

2.3. 具体例

2.3.1. グループ①：単一成分を描画する場合

図表 2.2 に示すような旧構造分類 0 類～5 類（旧構造分類の説明は 5.2 節参照）に該当する物質のほとんどは、図表 2.1 のグループ①に該当します。グループ①に該当した場合は、単一成分を描画してください。なお、オニウム塩（旧 0 類）及び無機塩（旧 1 類）等の塩を形成するものは塩として描画する必要があります。塩の描画方法の注意点は 3.1 節で解説します。

図表 2.2 グループ①に該当する構造式の例

旧 0 類	旧 1 類	旧 2 類	旧 3 類	旧 4 類	旧 5 類
					

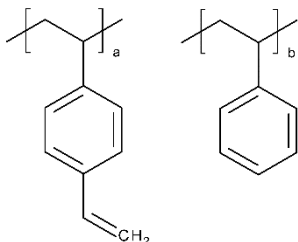
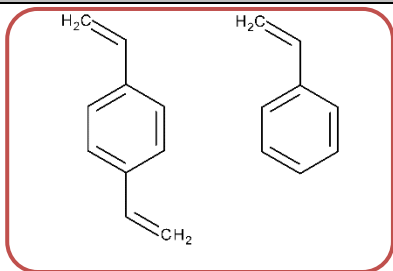
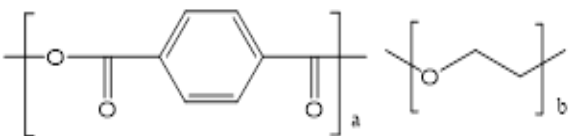
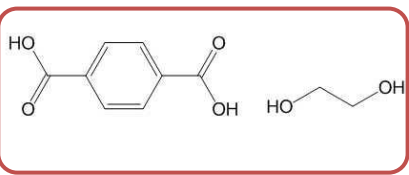
2.3.2. グループ②：単量体を描画する場合

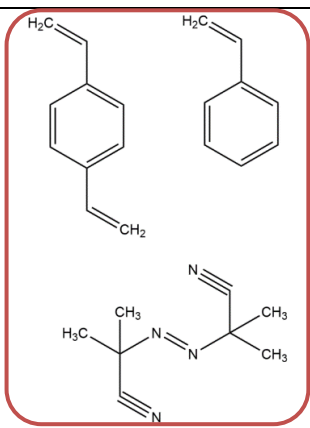
高分子化合物である場合は、図表 2.1 のグループ②に該当します。この場合、繰り返し単位を括弧で囲った一般的な高分子化合物の最終構造を描画するのではなく、高分子化合物の繰り返し単位である単量体を描画対象として選択してください。開始剤を含む場合は、開始剤も描画してください（例は図表 2.3 参照）。また、末端修飾を含む場合は、末端修飾する際に使用している化学物質を描画してください。

なお、原料として高分子化合物を用いている場合であっても、申出物質の単量体を描画対象としてください。

また、原料として主成分が特定可能であるものの構造不定の有機化合物を用いている場合、「グループ④主成分を描画する場合」を参照して申出物質の単量体の主成分を描画対象としてください。この場合、申出書の「高分子化合物の記載」と「主成分を記載」の両方を「1（有）」にしてください。

図表 2.3 ポリマーの場合に選択する構造の例

	申し出たい物質	選択する構造 →単量体
重合 反応 の場 合		
	申し出たい物質	選択する構造 →単量体
縮合 反応 の場 合		
	申し出たい物質	選択する構造 →単量体及び開始剤

開始剤を含む場合	$R \left[\text{CH}_2 - \text{CH} \left(\text{C}_6\text{H}_4\text{CH=CH}_2 \right) \right]_a \left[\text{CH}_2 - \text{CH} \left(\text{C}_6\text{H}_5 \right) \right]_b R$ $R = \text{H}$ or $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{---C---CH}_3 \\ \\ \text{CN} \end{array}$	
-----------------	--	--

2.3.3. グループ③：構成元素を描画する場合

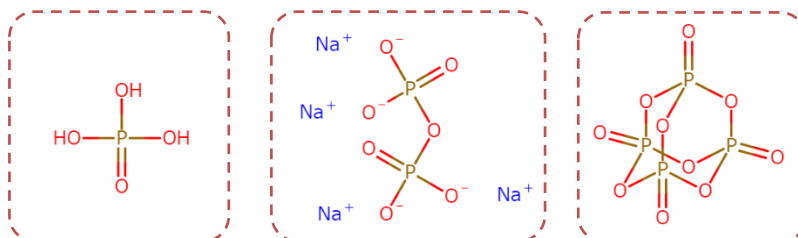
無機物であって、「構造式を作成可能な単一成分ではなく」かつ「高分子化合物でもない」場合は、図表 2.1 のグループ③に該当します。当該物質を申し出たい場合は、図表 2.4 に示すように、描画ソフトを使って、同一キャンパス内に申し出たい物質を構成している元素を併記して描画してください。その際、組成比率を表現する必要はありません。また、構成元素間の結合は表現しないように描画してください。

なお、描画ソフトとして ChemDraw 又は BIOVIA Draw を使用して元素を描画する場合、不要な水素が描画される（「P」を描画すると自動的に「PH₃」と描画される）ことがあります、問題はありません。

図表 2.4 構成元素を描画する場合の例

申し出たい物質	選択する構造 →構成元素を併記
$\text{Fe}_{0.8}\text{Cr}_{0.4}\text{Si}_{0.9}\text{Zn}_{1.5}\text{O}_{4.5}$	Fe Cr Si Zn O

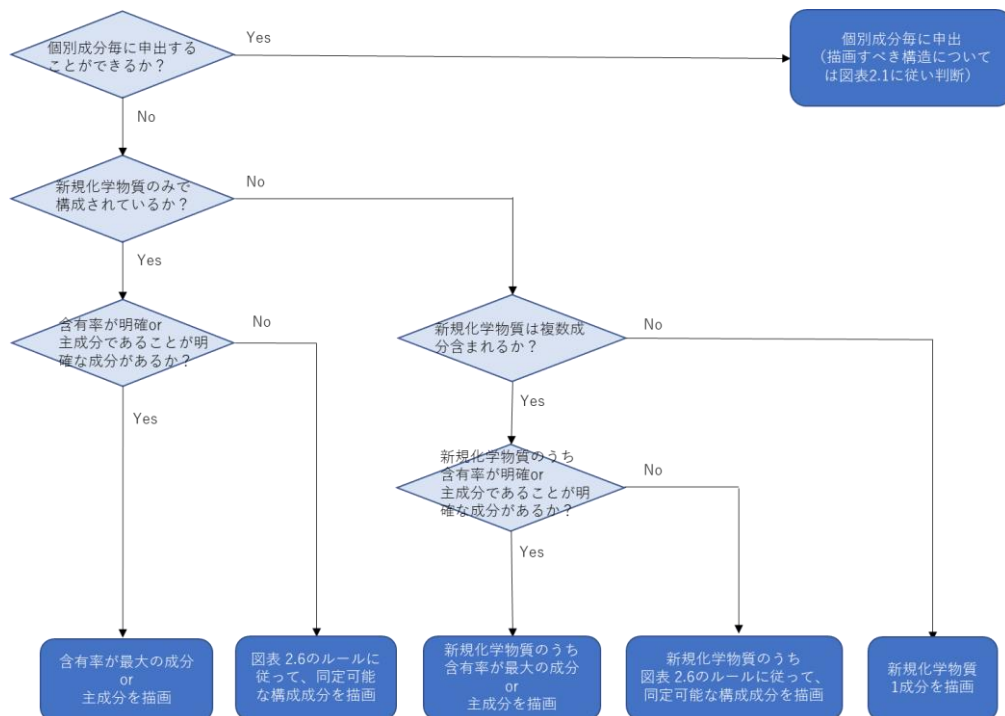
なお、無機化合物であっても以下のように構造同定可能な単一成分は、グループ①に該当するため、単一成分を描画してください。



2.3.4. グループ④：主成分を描画する場合

分離等できない混合物であって個別成分毎に申出できない場合²又は多成分から成る反応生成物であって主要な構成成分の構造が同定可能な場合が、図表 2.1 のグループ④に該当します。この場合、以下の手順に従って描画するようにしてください。

- 申出物質が新規化学物質のみで構成される混合物である場合
 - ①含有率が明確な場合は、含有率が最も大きい成分を主成分として描画してください。
 - ②含有率が不明確な場合は、図表 2.5 又は図表 2.6 のルールに従って、同定可能な構成成分を選択してください。また、含有率が不明確な場合であっても、主成分であることが明確な成分があれば、主成分を描画してください。
- 申出物質が新規化学物質と既存化学物質の混合物である場合
 - ①新規化学物質が1成分のみの場合は、当該成分を描画してください。
 - ②－1 新規化学物質が複数含まれる場合であって含有率が明確な場合には、新規化学物質のうち、含有率が最も大きい成分を主成分として描画してください。
 - ②－2 新規化学物質が複数含まれる場合であって含有率が不明確な場合は、図表 2.5 又は図表 2.6 のルールに従って、同定可能な新規化学物質の構成成分を選択してください。また、含有率が不明確な場合であっても、主成分であることが明確な新規化学物質の成分があれば、主成分を描画してください。



図表 2.5 主成分を描画する場合の構造選択に係る判断フロー

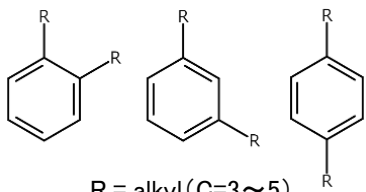
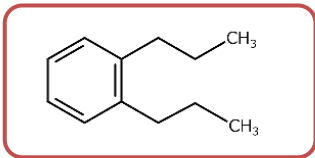
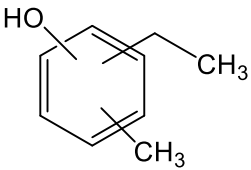
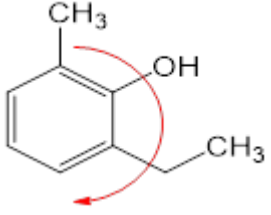
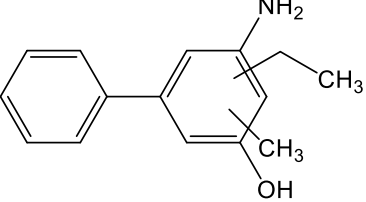
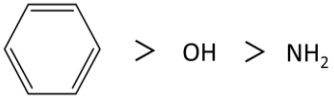
² 立体異性体の混合物については 3.4 をご参照ください。

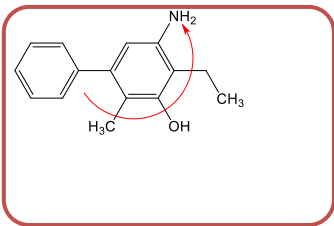
図表 2.6 主成分を描画する場合に適用する構造選択のルール

パターン	含有率が明確な場合	含有率が不明確な場合
ルール	含有率が最も大きい成分を選択	※優先順位はア>イ>ウ です。 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 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)

例えば、図表 2.7 の物質を申し出たい場合は、図表 2.6 のルールに従うと中央列の構造が選択されることになります。

図表 2.7 主成分を描画する場合の構造選択のルールを適用した例

申し出たい物質	選択する構造 →ルール ア～ウを適用	備考
 R = alkyl (C=3~5) 含有比率不明		ア～ウのルールを適用。 ア: C=3 を選択 イ: 直鎖を選択 ウ: 最小の位置番号を選択
		ウ' のルールを適用。 ウ': 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
	 分子量は上の順なので	ウ' のルールを適用。 ウ': 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。)
--	--	------------------------

2.3.5. グループ⑤：原料を描画する場合

図表 2.1 でグループ①～④に当てはまらない反応生成物等の物質は、グループ⑤に該当します。この場合、反応に関与する原料を全て描画してください（図表 2.8 の例を参照）。また、反応の前後で変化しない触媒等の物質は描画しないでください。

図表 2.8 原料を選択する構造の例

申し出たい物質	選択する構造 →原料
化学物質 X と化学物質 Y の 反応生成物 (構造式で表現できない)	(化学物質 X の構造式を 記入) 化学物質 Y の構造式を 記入)

2.3.6. グループ⑥：構造の推測に参考となる情報を添付・入力する場合

図表 2.1 でグループ⑥に該当する場合は、以前の少量新規化学物質の申出における旧構造分類で旧 8 類、旧 9 類に該当する場合です（旧構造分類の説明は 5.2 節参照）。製法の詳細や最終物質の構造についての情報等、構造の推測に参考となる情報を添付してください。申出システムにおいては「MOL ファイル取込」からではなく「構造の参考となるファイル」の「ファイル取込」からファイルを取り込んでください。書面申出の場合は、構造の推測に参考となる情報を記載した紙資料を申出書とは別に提出してください。

なお、構造の推測に参考となる情報がよくあるほど、適切に区分され、他の申出物質と混同される可能性が低くなります。

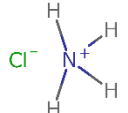
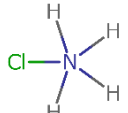
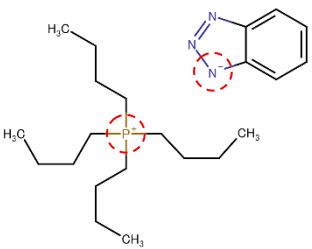
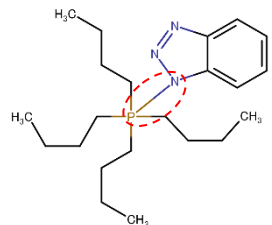
申出書の「高分子化合物の記載」「主成分を記載」「原料の記載」は全て「2（無）」にしてください。

3. 選択した構造を描画する際の共通ルール

3.1. イオン結合を有する化合物（塩など）

塩などのイオン結合を有する化合物は、カチオン（プラスの電荷を持つもの）とアニオン（マイナスの電荷を持つもの）を別々に表現し、結合鎖は使用しないでください。例えば、図表 3.1 の左側のように描画してください。なお、塩化水素塩の様に水素イオンを対カチオンとする塩の場合は、「化合物 A」と「HCl」という描画ではなく、カチオン化された化合物(A⁺)とアニオン（Cl⁻）という形で描画してください。

図表 3.1 イオン結合を有する化合物の描画ルールを適用した例

OK の場合	NG の場合
○  (塩化ナトリウム)	× 
○  (塩化アンモニウム)	× 
○  (テトラブチルホスホニウム＝ベンゾトリアゾールー1-イド)	× 

3.2. 水和物

水和物は、図表 3.2 のように、水分子と併記するように描画しないでください。

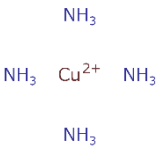
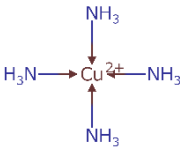
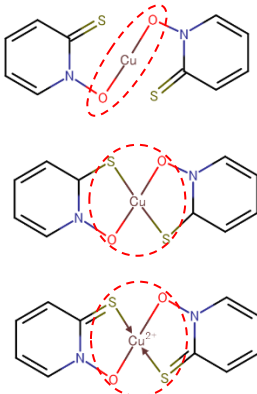
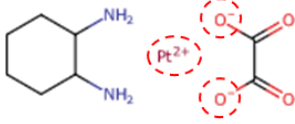
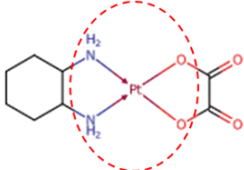
図表 3.2 水和物の描画ルールを適用した例

OK の場合	NG の場合
○ $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2$	× $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2 \quad \text{H}-\text{O}-\text{H}$ (ヒドラジーン水和物)

3.3. 配位結合を有する化合物（キレート物質等）

キレート物質等の配位結合を有する化合物は、配位結合を表現せず、かつ「+／－」対を単結合として表示しないでください。例えば、図表 3.3 であれば左側のように描画してください。

図表 3.3 配位結合を有する化合物の描画ルールを適用した例

OK の場合	NG の場合
○  (銅アンモニウム(イオン))	× 
○  (銅ピリチオン)※	× 
○  (オキサリプラチン)※	× 

※イオン結合を有する物質（3.1 節）と配位結合を有する物質（3.3 節）の複合パターン

3.4. 立体異性体を有する化合物

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、申出書には立体異性体を区別しない名称を記載いただくとともに、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。

また、従来、立体異性体の混合物として申し出していた場合は、混合物の名称は使用せず、単一の成分として名称を記載するとともに、立体異性体を区別しない構造式を描画してください（その場合、電算処理コード「②主成分を記載」を「2（無）」にしてください。）。

具体的には、「少量新規化学物質の申出（経済産業省 HP）³」に掲載されている「少量新規化学物質の申出手続について」の別添3をご参照ください。

³ 少量新規化学物質の申出（経済産業省 HP）：
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/todoke/shinki_shoryo_index.html

4. 描画における注意点

4.1. 描画ソフトでのテキスト追加機能の不使用のお願い

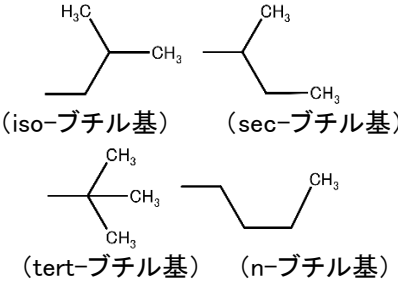
- ① 原子等の描画にあたっては、各描画ソフトの操作ガイダンスで示す方法に従って作業してください。操作にあたり、**図表 4.1 のテキスト追加機能は使わないでください。**
当該機能を使ってテキスト情報を記入すると、申し出たい構造とは異なる構造情報になる可能性があります。(例『Na を 4 つ描画したい場合』: 図表 4.1 のテキスト追加機能を用いて「4Na」と入力するのではなく、各描画ソフトに用意されている周期表等から「Na」原子を選択した上で、キャンパスを 4 回クリック (4 つの Na 元素を描画・入力) するようにしてください。)

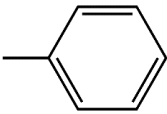
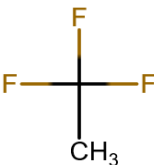
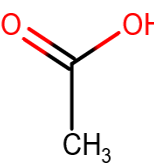
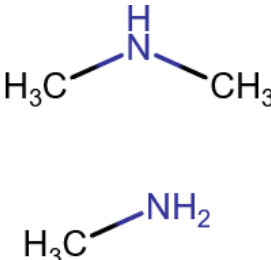
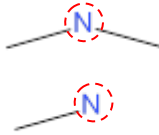
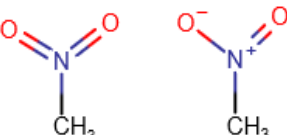
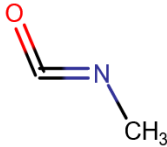
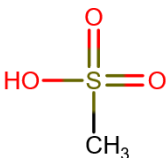
図表 4.1 使用できないテキスト追加機能

ソフト名称	テキスト追加機能	
	機能名称	ショートカットボタン
ChemDraw	「Text Tool」	
MarvinJS	「Text」	
BIOVIA Draw	「Text Tool」	

- ② 官能基を描画する際にも、テキスト追加機能による記述はしないでください。それぞれ図表 4.2 の例を参考にして正確な構造を記載してください。特に、長鎖炭化水素 ((CH₂)_n)、フルオロ基 (F)、カルボキシ基 (COOH)、アミノ基 (NH₂)、ニトロ基 (NO₂)、イソシアナト基 (NCO) 及びスルホ基 (SO₃H) は、テキスト機能を活用した官能基略語を使用して描画しないように、注意してください。

図表 4.2 官能基を描画する際の注意点の例

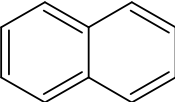
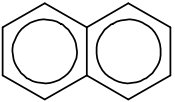
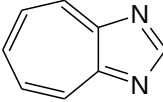
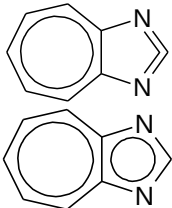
例	OK の場合	NG の場合
メチル基 (Methyl)	○ 	× -Me
エチル基 (Ethyl)	○ 	× -Et or -C ₂ H ₅
ブチル基 (Butyl)	○ 	× Bu or C ₄ H ₉

フェニル基 (Phenyl)	○		×	Ph or C ₆ H ₅
フルオロ基 (Fluoro)	○		×	CF_3 CH_3
カルボキシ基 (Carboxy)	○		×	COOH CH_3
アミノ基 (Amino)	○		×	 「N」をテキストで 記載しない
ニトロ基 (Nitro)	○		×	NO_2 CH_3
イソシアナト基 (Isocyanato)	○		×	NCO CH_3
スルホ基 (Sulfo)	○		×	SO_3H CH_3

4.2. 不飽和環状化合物

不飽和環状化合物を描画する際には、共鳴構造を表すリング（アロマチックボンド）を使用せず、それぞれ図表 4.3 の例を参考に記載してください。

図表 4.3 不飽和環状化合物を描画する際の注意点の例

例	OK の場合	NG の場合
4員環 (C_4H_4)、 5員環 (C_5H_5)、 6員環 (C_6H_6)、 7員環 (C_7H_7)...	○ 	× 
	○ 	× 
	○ 	× 
	○ 	× 
縮合環、複素環	○ 	× 
	○ 	× 

5. 参考情報

5.1. 「高分子化合物の記載」等の選択について

申出書等に記載する少量新規化学物質電算処理コード「高分子化合物の記載」、「主成分を記載」及び「原料の記載」については、「1（有）」か「2（無）」のどちらかを必ず記載する必要があります。選択に当たっては、図表 5.1 を参照してください。

図表 5.1 「高分子化合物の記載」等の選択についての説明

項目	説明
「高分子化合物の記載」	○高分子化合物の定義（図表 2.1）「① 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%未満であること。」及び「②数平均分子量が 1,000 以上の化合物」に該当する化合物は、「有」を選択又は「1」を記載してください。 なお、溶媒に不溶である等の理由で分子量が測定できない物質は、高分子化合物の②の定義に合致するものとみなして、「有」を選択又は「1」を記載してください。 ○高分子化合物の単量体を描画し、開始剤や鎖の末端修飾を原料で描画する場合は、「高分子化合物の記載」は「有」又は「1」を、「原料の記載」は「無」又は「2」を選択又は記載してください。 ○高分子化合物であっても、単量体の構造が不明などの理由により原料を描画する場合は、下記「原料の記載」に従ってください。
「主成分を記載」	○図表 2.1 のグループ④に該当するものであって、含有率が最も大きい成分、又は個別成分の含有率が不明で図表 2.5 又は図表 2.6 のルールに基づき構成成分を描画する場合は、「有」を選択又は「1」を記載してください。 ○高分子化合物であって、単量体について 2.3.4 節に基づき主成分を描画する場合は、「高分子化合物の記載」と「主成分を記載」の両方について「有」を選択又は「1」を記載してください。
「原料の記載」	○図表 2.1 のグループ①～④に当てはまらない物質（申出物質の構造が全く判らない場合など）で、2.3.5 節に基づき、申出物質を原料で描画する場合は、「有」を選択又は「1」を記載してください。 ○高分子化合物であっても、単量体の構造が不明などの理由により原料を描画する場合は、「有」を選択又は「1」を記載してください。この場合、「高分子化合物の記載」は「無」を選択又は「2」を記載してください。

※一つの申出内において、「高分子化合物の記載」及び「原料の記載」の両方が「有」又は「1」となることはありませんので、ご注意ください。

5.2. 旧構造分類

以前の少量新規申出において利用されていた旧構造分類は図表 5.2 のとおりとなります。

図表 5.2 旧構造分類に係る説明及び例

構造分類	分類名	説明及び例
1 類	無機化合物	有機化合物 ⁴ でないもの
2 類	有機鎖状低分子化合物	分子内に環状構造を含まない有機低分子化合物
3 類	有機炭素単環低分子化合物	単独の炭素環を含む化合物 注 1) 複素環、縮合環及びスピロ環は含まないこと。 注 2) 炭素環が 2 つ以上ある場合は、1 つの環から別の環へたどるとき、必ず炭素以外の元素を通過しなくてはならない。
4 類	有機炭素多環低分子化合物	炭素のみで構成された環を含む 3 類以外の化合物 例： ①環と環が直接つながっているもの ②縮合環 ③環から環へたどったとき炭素のみを通過してたどれるもの
5 類	有機複素環低分子化合物	複素環を含む化合物（酸無水物、エポキシを含む。）
6 類	有機重合系高分子化合物	炭素－炭素二重結合の付加重合により製造される高分子化合物（オリゴマーを含む。）
7 類	有機縮合系高分子化合物	繰り返し単位をもつ高分子化合物（オリゴマーを含む。）のうち 6 類以外のもの
8 類	化工でんぷん、加工油脂等	天然物誘導体及び天然物と同一構造の化合物
9 類	構造不明等化合物	上記 1～8 類に分類できない化合物
0 類	有機化合物のオニウム塩及び付加塩	上記 2～7 類に該当する化合物のうち、 イ．対をなす分子がいずれも新規化学物質である付加塩 又は ロ．対となる分子イオンがいずれも既存化学物質の構成イオンでないオニウム塩

⁴ 有機化合物は①～③のいずれかに該当する化合物；

① C－C 間の共有結合を有する

② C－H 間 or C－X（ハロゲン）間の共有結合を有する

③ C－N 間の一重 or 二重結合を有する