

# 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 1.1 版

平成 30 年 7 月 30 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

## 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)

**目次**

1. 本ガイドンスの位置付け.....	1
2. 構造情報を作成する対象の選択方法.....	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.....	2
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.....	6
2.3.4. グループ④：主成分を描画する場合.....	7
2.3.5. グループ⑤：原料を描画する場合.....	9
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.....	10
3. 選択した構造を描画する際の共通ルール.....	11
3.1. イオン結合を有する化合物（塩など）.....	11
3.2. 水和物.....	11
3.3. 配位結合を有する化合物（キレート物質等）.....	12
4. 描画における注意点.....	13
4.1. 描画ソフトでのテキスト追加機能の利用.....	13
4.2. 官能基.....	13
4.3. 不飽和環状化合物.....	14
5. 参考情報.....	15
5.1. 構造分類.....	15

## 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 (P. 2～)
- 選択した構造を描画する際のルール (P. 11～)
- 描画における注意点 (P. 13～)

について説明する資料です。

実際に構造式を描画する際には、図表 1.1 のソフトを利用してください。下記以外のソフト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。

なお、インターネットから MOL ファイルをダウンロードして利用する場合には、当該 MOL ファイルの利用規約を遵守してください。その上で図表 1.1 のソフトに読み込んで使用することについては問題ありません。

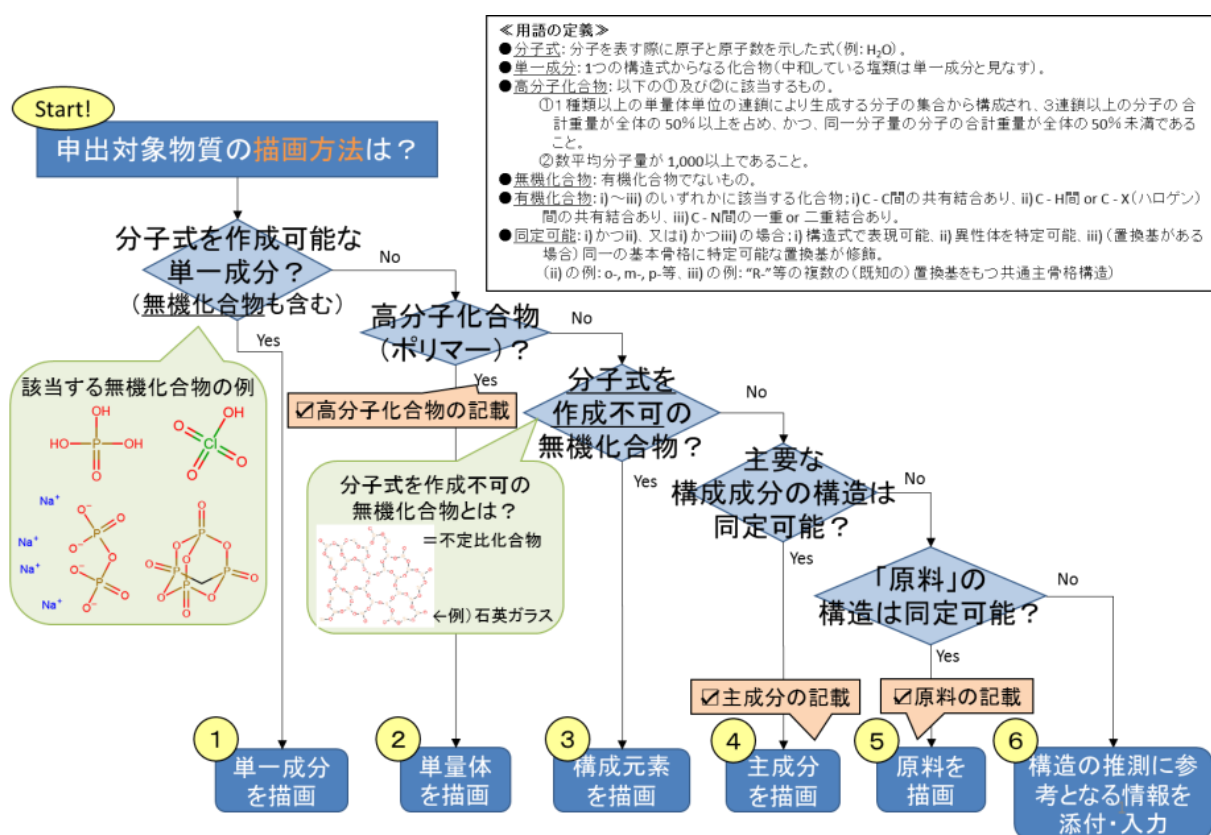
図表 1.1 申出手続きに利用可能な描画ソフト

種類	ソフト名称	確認済みバージョン	対応 OS	対応言語	マニュアル	開発元	ダウンロード・利用先 URL
有償ソフト	ChemDraw	ChemDraw Professional/Prime 16  ChemDraw Direct	Windows、Mac OS	英語	あり (日本語)	PerkinElmer (CambridgeSoft)	<a href="http://informatics.perkinelmer.co.jp">http://informatics.perkinelmer.co.jp</a>
フリーソフト	MarvinJS		Windows、Mac OS	英語	あり (日本語)	Chemaxon	<a href="https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/syuryou/mol/">https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/syuryou/mol/</a>
	BIOVIA Draw	2017 R2	Windows	英語	あり (日本語)	Dassault Systems Biovia	<a href="http://accelrys.com/products/collaborative-science/biovia-draw/draw-no-fee.php">http://accelrys.com/products/collaborative-science/biovia-draw/draw-no-fee.php</a>

## 2. 構造情報を作成する対象の選択方法

### 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構造を判断してください。なお、判断の過程でチェックボックス（「高分子化合物を記載」かどうか、「主成分を記載した」かどうか、「原料を記載した」かどうか）に該当する場合は、申出システムを利用しての申請であれば申請画面のチェックボックスにチェックをしてください。申出システムを利用していない場合は、申出書様式の該当欄に「1」を記入してください。チェックボックスにチェックを入れないと、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。



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

基本的なルールとして、従来どおり個別成分ごとに申し出て頂くことが必要となります。そのため、新規化学物質が他の化合物と混合されたもの(いわゆる混ぜもの)についても、個別成分ごとに申し出て頂く必要があります。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、主成分の構造を特定できる場合はグループ④

2 構造情報を作成する対象の選択方法  
2.2 構造選択にあたっての基本的なルール

---

の主成分による描画方法を選択してください。個別成分の構造又は含有率が不明な場合には、グループ④の主成分又はグループ⑤の原料による描画方法を選択してください。

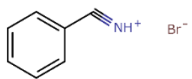
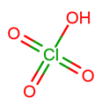
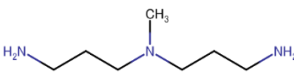
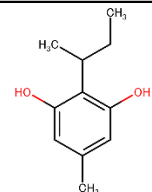
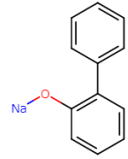
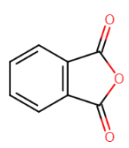
- 2 構造情報を作成する対象の選択方法  
 2.3 具体例  
 2.3.1 グループ①：単一成分を描画する場合
- 

## 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）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 節で詳しく解説します。

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 構造情報を作成する対象の選択方法  
 2.3 具体例  
 2.3.2 グループ②：単量体を描画する場合

2.3.2. グループ②：単量体を描画する場合

高分子化合物（図表 2.1 の②の場合）

高分子化合物を申し出たい場合、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。開始剤や鎖の末端修飾を含む場合は、これらも描画してください（例は図表 2.3 参照）。

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下さい。

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は、「④主成分を描画」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下さい。この場合、申出書の「高分子化合物の記載」と「主成分の記載」の両方にチェックを入れてください。

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		
縮合反応の場合		
開始剤や鎖の末端修飾を含む場合		



- 2 構造情報を作成する対象の選択方法
  - 2.3 具体例
    - 2.3.3 グループ③：構成元素を描画する場合

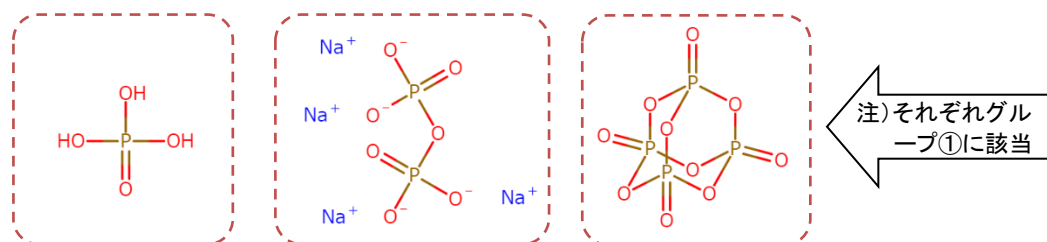
### 2.3.3. グループ③：構成元素を描画する場合

無機物であって、「分子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。

図表 2.4 ポリマー以外で原料を選択する構造の例

申し出たい物質	選択する構造 →構成元素を併記
$\text{Fe}_{0.8}\text{Cr}_{0.4}\text{Si}_{0.9}\text{Zn}_{1.5}\text{O}_{4.5}$	<div style="border: 1px solid red; padding: 5px; display: inline-block;">           Fe   Cr   Si   Zn   O         </div>

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 構造情報を作成する対象の選択方法  
 2.3 具体例  
 2.3.4 グループ④：主成分を描画する場合

2.3.4. グループ④：主成分を描画する場合

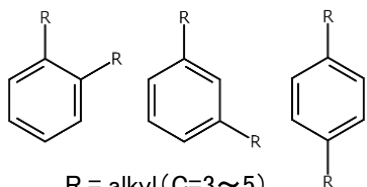
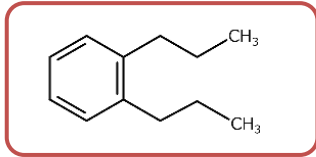
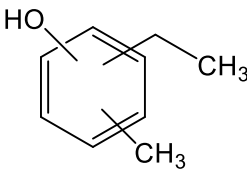
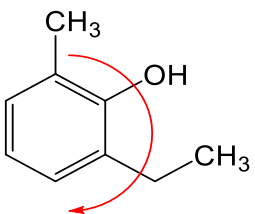
反応生成物であって個別成分が不明な場合などが、図表 2.1 のグループ④に該当します。この場合は、含有率が最も大きい成分を主成分として描画してください。含有率が不明な場合は、図表 2.5 又は図表 2.6 のルールに従って、同定可能な構成成分を選択してください。

図表 2.5 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 2.6 の物質を申し出たい場合は、図表 2.5 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。

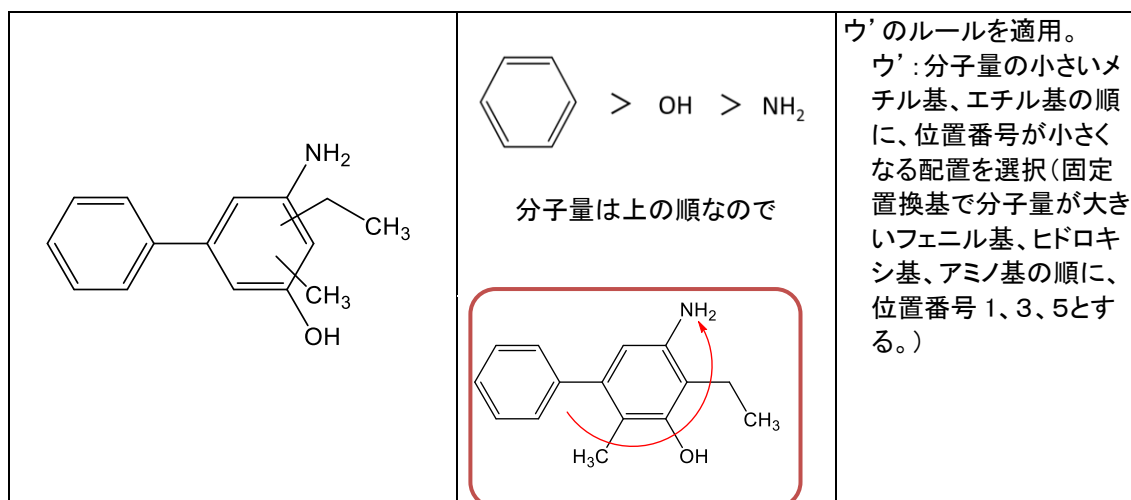
図表 2.6 主成分を描画する場合の構造選択のルールを適用した例

申し出たい物質	選択する構造 →ルールア～ウを適用	備考
 <p>R = alkyl (C=3~5) 含有比率不明</p>		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

## 2 構造情報を作成する対象の選択方法

### 2.3 具体例

#### 2.3.4 グループ④：主成分を描画する場合



- 2 構造情報を作成する対象の選択方法
  - 2.3 具体例
  - 2.3.5 グループ⑤：原料を描画する場合
- 

### 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、原料を描写してください（図表 2.7 の例を参照）。

図表 2.7 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)	<div style="border: 2px solid red; border-radius: 15px; padding: 10px; text-align: center;">(化学物質 X の構造式を 記入) 化学物質 Y の構造式を 記入)</div>

## 2 構造情報を作成する対象の選択方法

### 2.3 具体例

#### 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

---

#### 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構造分類で 8 類、9 類に該当する場合です（構造分類の説明は 5 章参照）。製法の詳細等、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。なお、構造の推測に参考となる情報が多くあるほど、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。

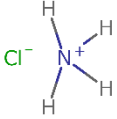
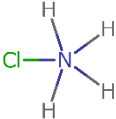
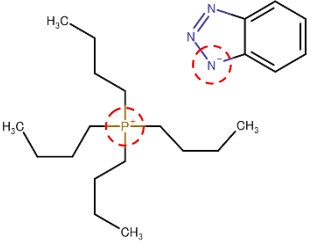
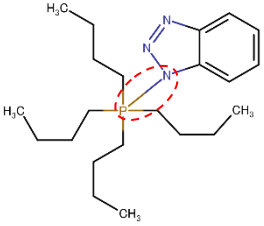
3 選択した構造を描画する際の共通ルール  
 3.1 イオン結合を有する化合物（塩など）

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）

イオン結合を有する塩化合物は、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 であれば左側のように描画してください。

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
○ $\text{Cl}^- \text{Na}^+$ (塩化ナトリウム)	× $\text{Cl}-\text{Na}$
○  (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-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

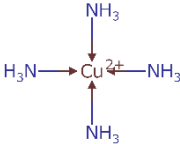
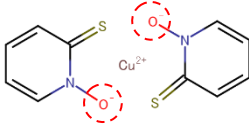
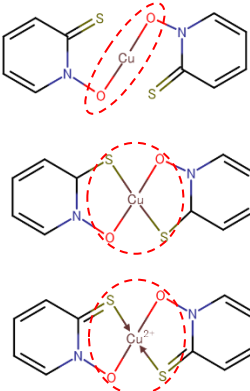
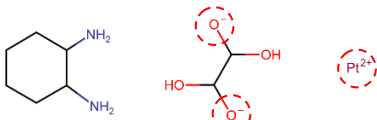
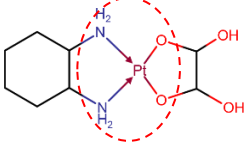
OK の場合	NG の場合
○ $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2$	× $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2 \quad \text{H}-\text{O}-\text{H}$ (ヒドラジン-水和物)

- 3 選択した構造を描画する際の共通ルール  
 3.3 配位結合を有する化合物（キレート物質等）

### 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
<p>○</p> <p style="text-align: center;">NH<sub>3</sub></p> <p style="text-align: center;">NH<sub>3</sub> Cu<sup>2+</sup> NH<sub>3</sub></p> <p style="text-align: center;">NH<sub>3</sub></p> <p style="text-align: center;">(銅アンモニウム(イオン))</p>	<p>×</p> 
<p>○</p>  <p style="text-align: center;">(銅ピリチオン)※</p>	<p>×</p> 
<p>○</p>  <p style="text-align: center;">(オキサリプラチン)※</p>	<p>×</p> 

※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

#### 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利用

#### 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利用

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、構造情報としては無視された MOL ファイルが作成・出力されることになり、申し出たい構造と異なる構造情報が提出される可能性が高まります。(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。)



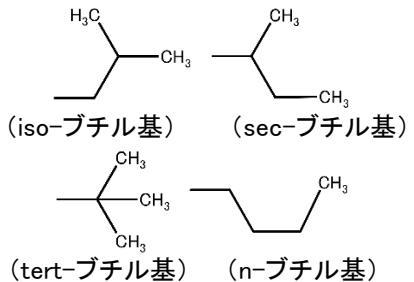
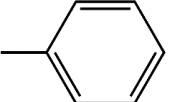
図表 4.1 使用できないテキスト追加機能

種類	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
有償ソフト	ChemDraw	「Text Tool」	
フリーソフト	MarvinJS	「Text」	
	BIOVIA Draw	「Text Tool」	

##### 4.2. 官能基

官能基を描画する際には、官能基略語は使用せず、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。

図表 4.2 官能基を描画する際の注意点の例









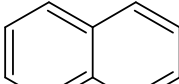

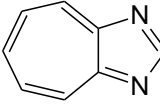
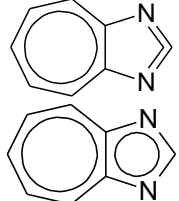
例	OK の場合	NG の場合
メチル基 (Methyl)	○ 	× -Me
エチル基 (Ethyl)	○ 	× -Et or -C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
ブチル基 (Butyl)	○  (iso-ブチル基) (sec-ブチル基) (tert-ブチル基) (n-ブチル基)	× Bu or C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>
フェニル基 (Phenyl)	○ 	× Ph or C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>



### 4.3. 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 不飽和結合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 <sub>4</sub> H <sub>4</sub> )、 5員環 (C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> )、 6員環 (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> )、 7員環 (C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> )...	○ 	× 
	○ 	× 
	○ 	× 
	○ 	× 
縮合環、複素環	○ 	× 
	○ 	× 

## 5. 参考情報

### 5.1. 構造分類

以前の少量新規申出において利用されていた構造分類は図表 5.1 の通り。

図表 5.1 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 <sup>1</sup> 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

<sup>1</sup> 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