

molFileCheck ツール操作マニュアル

経済産業省 製造産業局
化学物質管理課 化学物質安全室

2019/12/13

目次

1 はじめに	2
2 動作環境	3
2.1.1 動作環境	3
3 事前準備	4
4 molFileCheck ツール実施	4

1 はじめに

mol ファイル様式チェックツール（以下、「molFileCheck ツール」という）のご利用ありがとうございます。

平成 29 年に公布された改正化審法により低生産量新規化学物質、少量新規化学物質の確認制度が見直され、平成 31 年度より全国数量上限がこれまでの「製造輸入量」から「用途情報」も加味した「環境排出量」に変更されます。これに伴い、申出内容の変更、申出手続きの変更等、運用が一新されました。

この変更に伴い、少量新規化学物質の申出書作成の際に構造コードが廃止され、新たに mol ファイルまたは構造の参考となるファイルの提出が求められます。mol ファイルまたは構造の参考となるファイルは書面申請の場合も提出が求められ、mol ファイルについては事前に様式のチェックを行い、提出可能な mol ファイルであることを確認する必要があります。

本書では、書面申請の申出書を作成する利用者を対象に、提出する mol ファイルの様式が化審法低生産量・少量新規化学物質の申出において利用可能なものであることを事前に確認する手順をご説明します。本書の構成は次の通りです。第 2 章では、書面申請の molFileCheck ツールの動作環境を記載しています。第 3 章では molFileCheck ツールを使用する前に必要な準備作業を記載しています。第 4 章では molFileCheck ツールの使用手順について記載しています。

書面申請において mol ファイルを作成する際は、必ず molFileCheck ツールの「ダウンロード手順書」、および本書（「molFileCheck ツール操作マニュアル」）をご覧ください。

なお、電子申請または光ディスク申請における低生産量新規化学物質、少量新規化学物質の確認申出の申出書データ作成の支援を目的として「化審法低生産量・少量新規化学物質申出システム」（以下、「申出システム」という）を別途提供しており、molFileCheck ツールと同等のチェックを申出システム側で行いますので、電子申請または光ディスク申請においては molFileCheck ツールを使用する必要はありません。書面申請の場合は申出システムで申出書を作成したかどうかにかかわらず、molFileCheck ツールを使用して提出 mol ファイルのチェックを行う必要があります。

なお、molFileCheck ツールおよびマニュアルを適用した結果のパソコンへの影響については、責任を負いかねますので予めご了承ください。

molFileCheck ツールの内容・仕様は、訂正・改善のため予告なく変更することがあります。

また、本書の記載内容は予告なく変更されることがありますので予めご了承ください。

Microsoft および Windows は米国マイクロソフト社の米国およびその他の国における登録商標です。

2 動作環境

本章では、molFileCheck ツールの動作環境について説明します。

2.1.1 動作環境

molFileCheck ツールの推奨環境は以下の通りです。

項目	主な仕様
OS	Microsoft Windows 8.1/10 (32bit/64bit) 日本語版
CPU	1 ギガヘルツ (GHz) 以上の 32 ビット (x86) プロセッサ または 64 ビット (x64) プロセッサ
メモリ	1 ギガバイト (GB) RAM (32 ビット) または 2GB の RAM (64 ビット)
ディスク容量	16GB (32 ビット) または 20GB (64 ビット) の空き容量のあるディスク領域
デバイス	解像度 1024×756 以上で 256 色以上出力可能なモニタ、キーボード、マウス
.Net Framework	4.5.1

3 事前準備

本章では molFileCheck ツールを使用する前に予め準備する必要がある内容について説明します。

molFileCheck ツールを使用するには以下の準備が必要となります。

- (1) molFileCheck ツールをインストールするパソコンに、molFileCheck ツールの「ダウンロード手順書」を参照の上、molFileCheck ツールをダウンロードしてください。
- (2) チェック対象となる mol ファイルを用意または作成してください。mol ファイルの様式については、指定の mol ファイル作成ソフト (ChemDraw、MarvinJS、BIOVIA DRAW のいずれかのツールで作成されたファイルを対象としています) を用いて作成したファイルを利用するようにしてください。
※mol ファイル名、mol ファイルを格納しているフォルダ名等に環境依存文字を設定すると、チェック後の mol ファイルが出力されない場合がございますので使用しないようお願いいたします。
- (3) チェックが完了した mol ファイルと構造式画像を格納する出力先フォルダを作成してください。
- (4) mol ファイルを取り込む申出書の受付コードを用意してください。

(2), (3), (4) は molFileCheck ツール内で作成することができませんので、あらかじめ作成または用意をお願いします。

4 molFileCheck ツール実施

本章では実際に molFileCheck ツールを使用する手順について説明します。作業の流れは以下の通りです。

- ① molFileCheck ツールを起動する
- ② mol ファイルを選択する
- ③ 出力先フォルダを選択する
- ④ 受付コードを入力する
- ⑤ molFileCheck ツールを動作させ、結果を確認する
- ⑥ 構造式画像を出力する。
- ⑦ molFileCheck ツールを終了する。

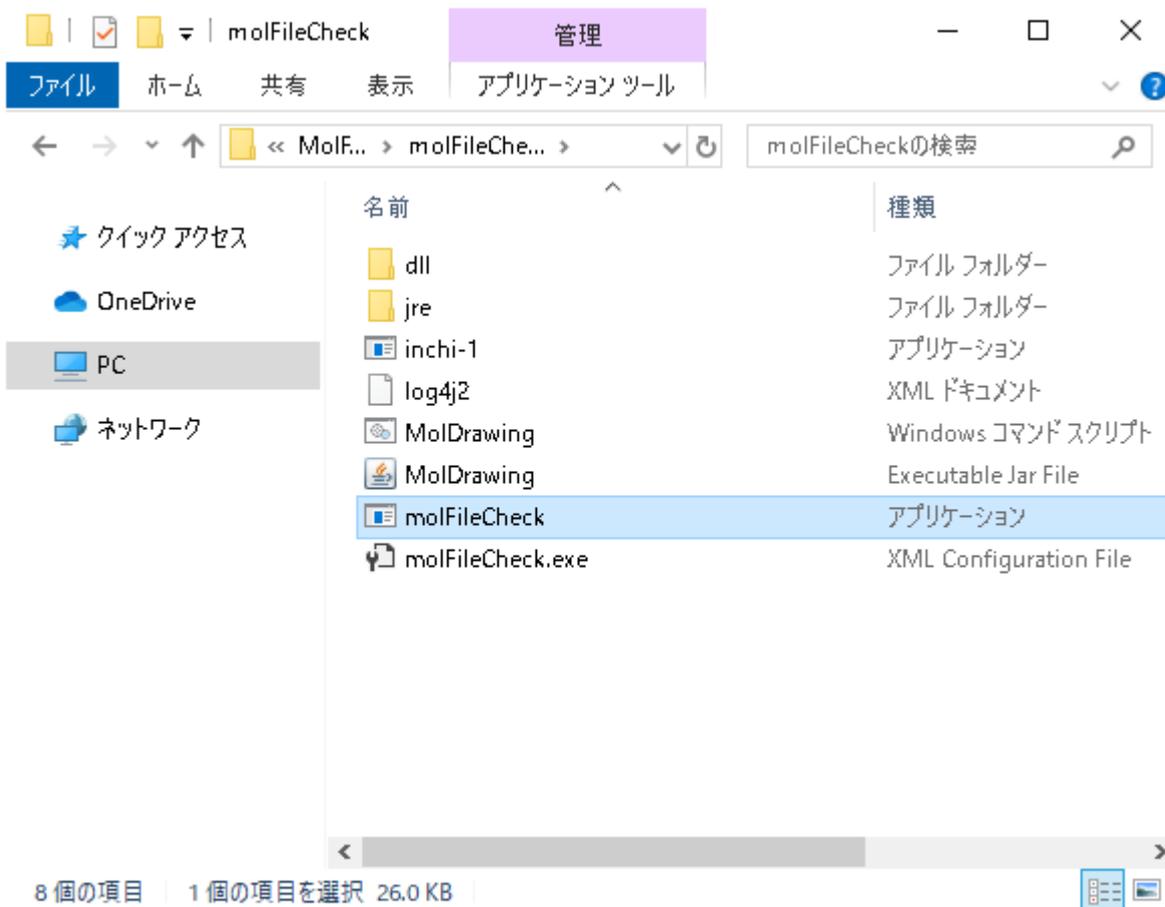
「3 事前準備」が完了していることを確認してから実施してください。

本章の手順に従って molFileCheck ツールが完了すると、出力先フォルダにファイル名が「受付コード.mol」の mol ファイルと「受付コード.png」の画像ファイルが作成されます。

※画像ファイルに関しては、申出書の『新規化学物質の構造式又は示性式 (いずれも不明の場合は、その製法の概略)』に添付してください。

②～⑥は繰り返し実行可能です。

① molFileCheck ツールを起動させます。「3 事前準備」でダウンロードした molFileCheck フォルダの molFileCheck をダブルクリックして起動してください。



※Windows の設定で拡張子を表示させている場合は、「molFileCheck」は「molFileCheck.exe」と表示されます。

molFileCheck

molファイル 参照

出力先フォルダ 参照

受付番号

法人番号(13桁)

年度(2桁)

申出番号(4桁)

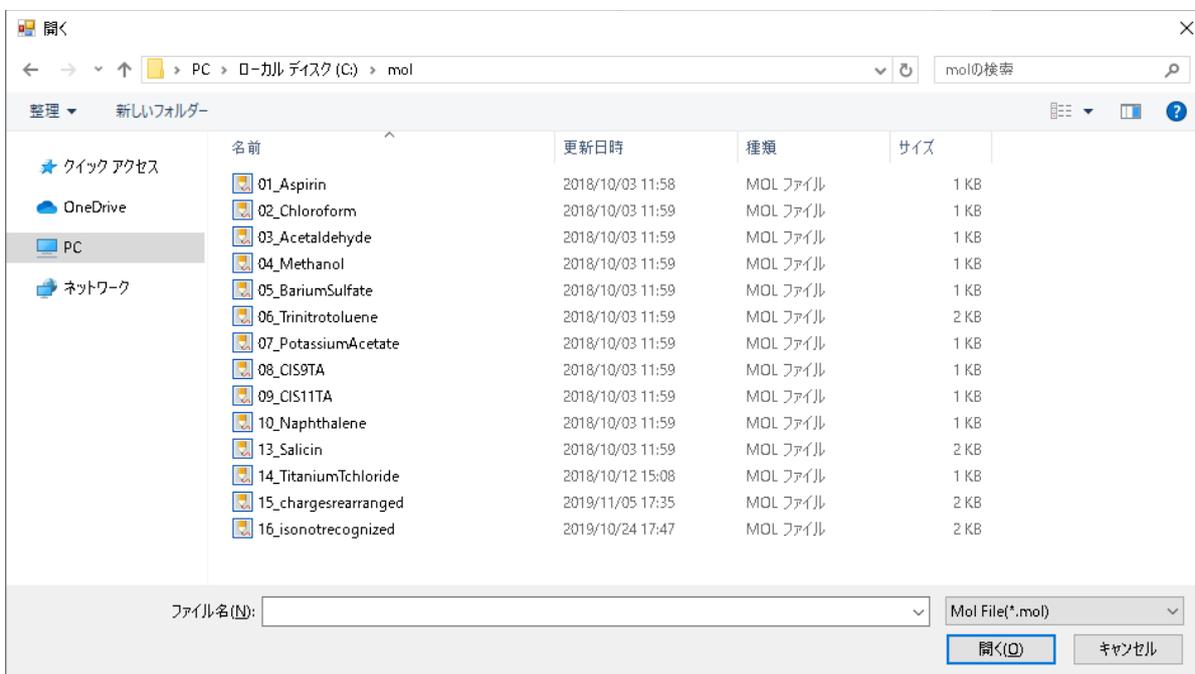
処理結果

構造式

・起動した molFileCheck ツール

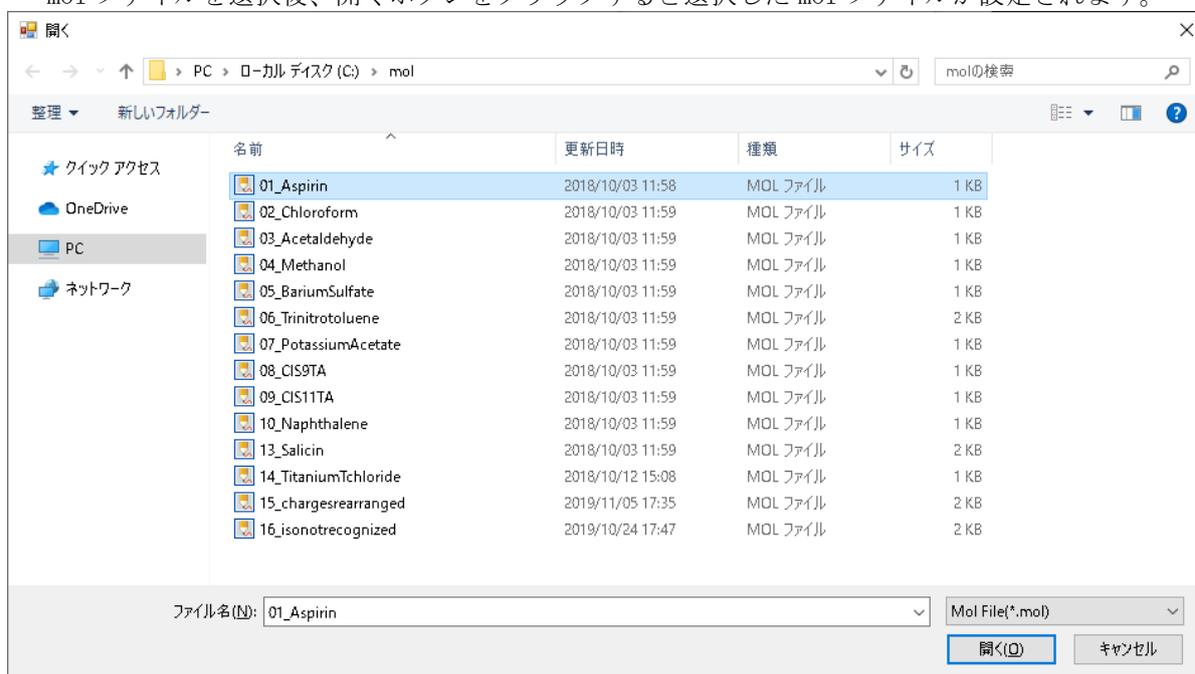
(注) 受付番号は申出書の受付コードに該当します。

- ② 対象とする mol ファイルを選択します。mol ファイルの項目横の参照ボタンをクリックすると、ファイル選択のダイアログが表示されます。



・ mol ファイル選択ダイアログ

mol ファイルを選択後、開くボタンをクリックすると選択した mol ファイルが設定されます。



・ mol ファイル選択

molFileCheck

molファイル

出力先フォルダ

受付番号

法人番号(13桁)

年度(2桁)

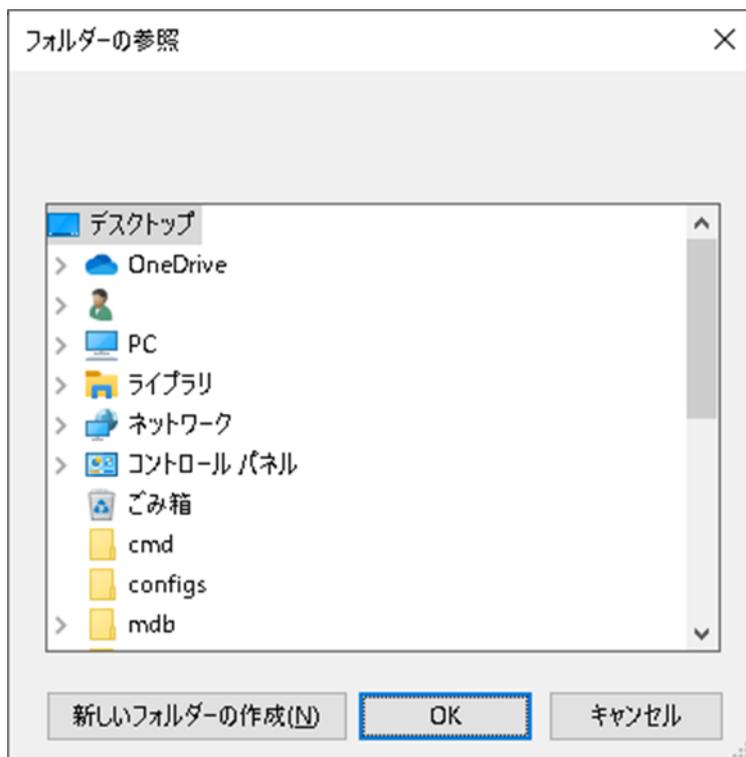
申出番号(4桁)

処理結果

構造式

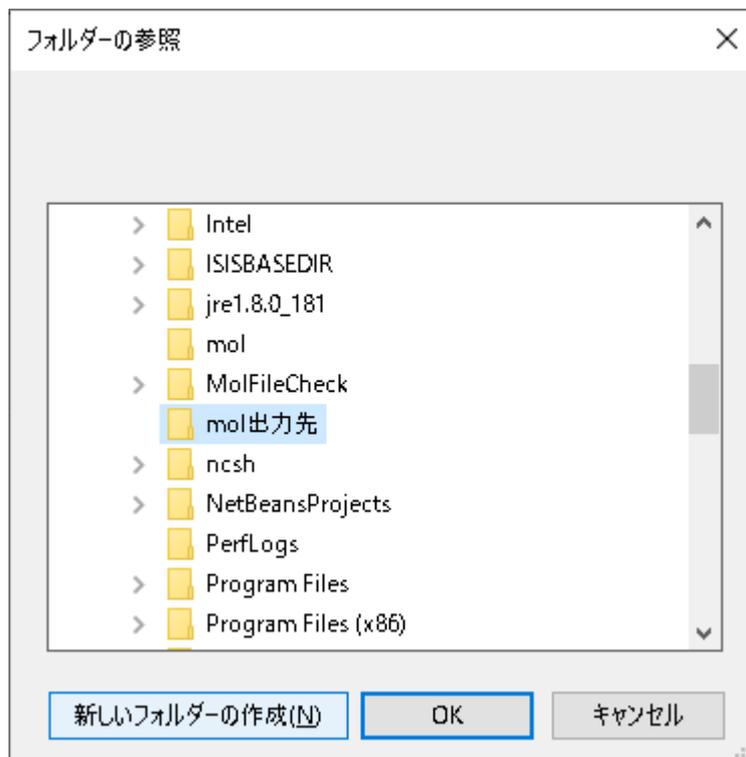
・開くボタンクリック後

- ③ 出力先フォルダを指定します。出力先フォルダの項目横の参照ボタンをクリックすると、フォルダ選択のダイアログが表示されます。



・フォルダ選択ダイアログ

mol ファイルを出力したいフォルダを選択し、OK ボタンをクリックすると選択したフォルダが設定されます。



・フォルダ選択

molFileCheck

molファイル 参照

出力先フォルダ 参照

受付番号

法人番号(13桁)

年度(2桁)

申出番号(4桁)

処理結果

構造式

・OK ボタンクリック後

④ 受付コード受付番号欄に入力します。受付番号については「法人番号(13桁)+受付年度(西暦下2桁)+通し番号(4桁)のフォーマットになっております。対応する申出書の受付コードを確認の上、誤りがないことを確認ください。

※法人番号とは、行政手続における特定の個人を識別するための番号の利用等に関する法律（平成二十五年法律第二十七号）第39条第1項又は同条第2項の規定により指定されたものをいいます。法人番号は以下のサイトから検索可能です。

<https://hojin-info.go.jp/hojin/TopPage>

The screenshot shows a window titled "molFileCheck" with a close button (X) in the top right corner. The window contains several input fields and buttons:

- molファイル**: Input field containing "C:\mol\01_Aspirin.mol" and a **参照** button.
- 出力先フォルダ**: Input field containing "C:\mol出力先" and a **参照** button.
- 受付番号**: A section containing three input fields:
 - 法人番号(13桁)**: Input field containing "1234567890123".
 - 年度(2桁)**: Input field containing "20".
 - 申出番号(4桁)**: Input field containing "0001".
- 処理結果**: A large empty text area with a **チェック** button to its right.
- 構造式**: A large empty text area with a **構造式出力** button to its right.

・受付コードの入力

- ⑤ molFileCheck ツールを動作させます。② ～ ④の項目に間違いが無ければ、チェックボタンをクリックすることで mol ファイルのチェックが実行されます。処理結果欄に実行結果が表示されます。チェック結果が OK の場合は、構造式画像が表示され、連番で次の申出番号が自動的に入力されます。

molFileCheck

molファイル

出力先フォルダ

受付番号

法人番号(13桁)

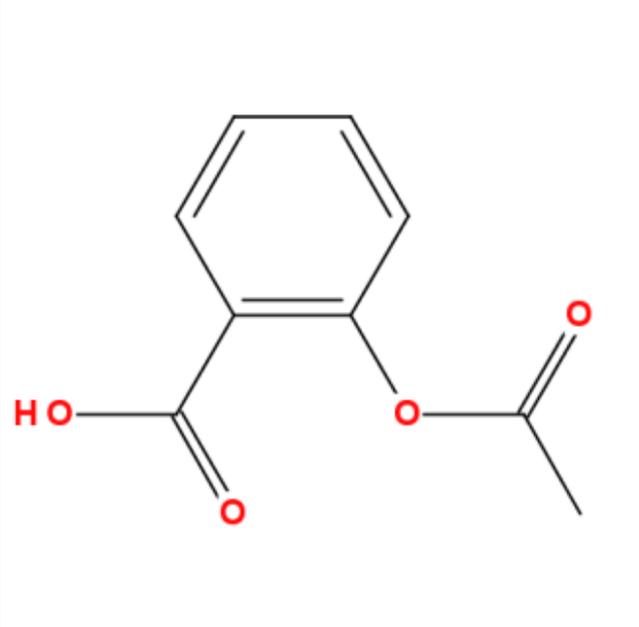
年度(2桁)

申出番号(4桁)

処理結果

[molファイル] C:\mol\01_Aspirin.mol
[チェック結果] OK
[メッセージ]
C:\mol出力先\1234567890123200001.molへのファイルコピーが正常に終了しました。
[molファイルのコピー元とコピー先の履歴]
--- 2019/12/06 10:58:12 -----
C:\mol\01_Aspirin.mol
→ C:\mol出力先\1234567890123200001.mol

構造式 1234567890123200001.mol

CC(=O)Oc1ccc(cc1)C(=O)O

・チェックボタンクリック後

※チェック結果が OK の場合でもメッセージが表示される場合があります。その場合は mol ファイルの再作成が推奨されていますが、描画内容が間違っていない、修正内容が分からない場合はそのままでも提出は可能です。

molFileCheck

molファイル 参照

出力先フォルダ 参照

受付番号

法人番号(13桁)

年度(2桁)

申出番号(4桁)

処理結果

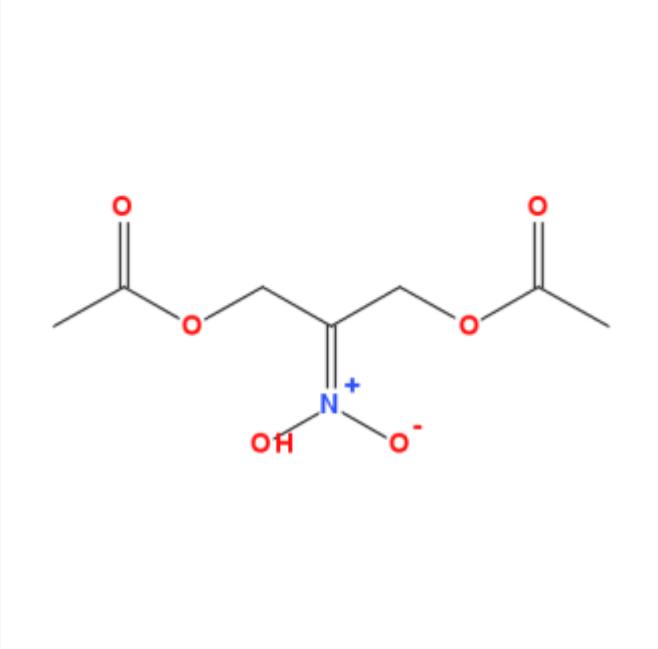
[molファイル] C:\mol\15_chargesrearranged.mol
[チェック結果] OK
[メッセージ] Charges were rearranged

C:\mol出力先\1234567890123200002.molへのファイルコピーが正常に終了しました。

[molファイルのコピー元とコピー先の履歴]

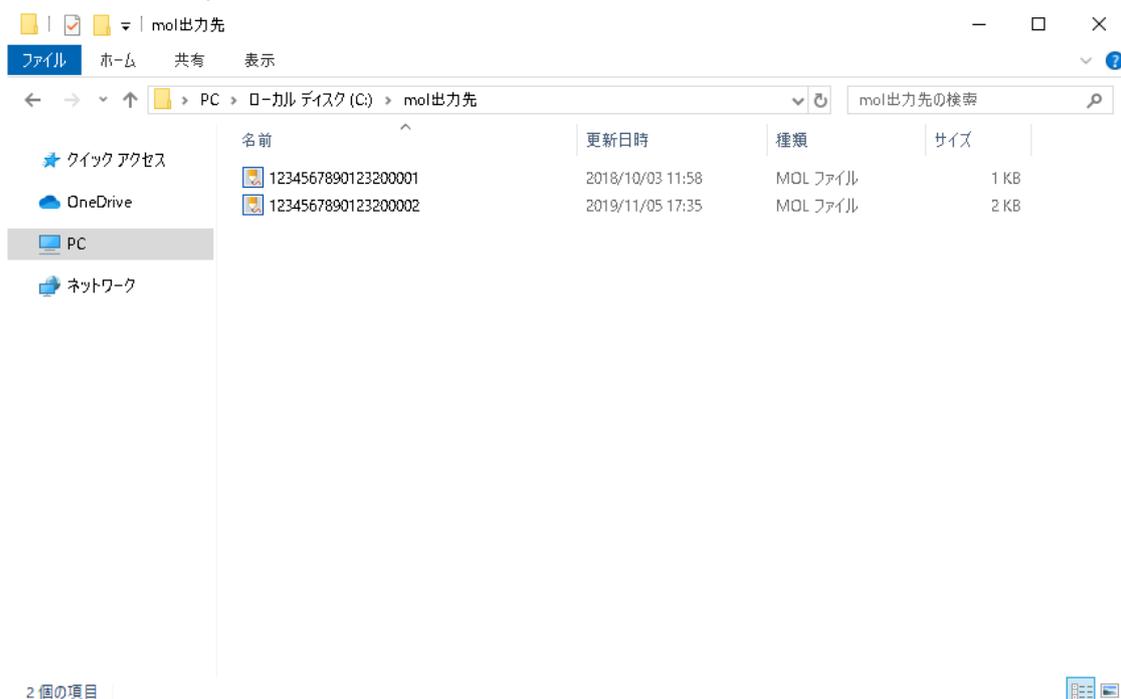
--- 2019/12/06 10:58:12 -----
C:\mol\01_Aspirin.mol
→ C:\mol出力先\1234567890123200001.mol
--- 2019/12/06 11:03:36 -----

構造式 1234567890123200002.mol



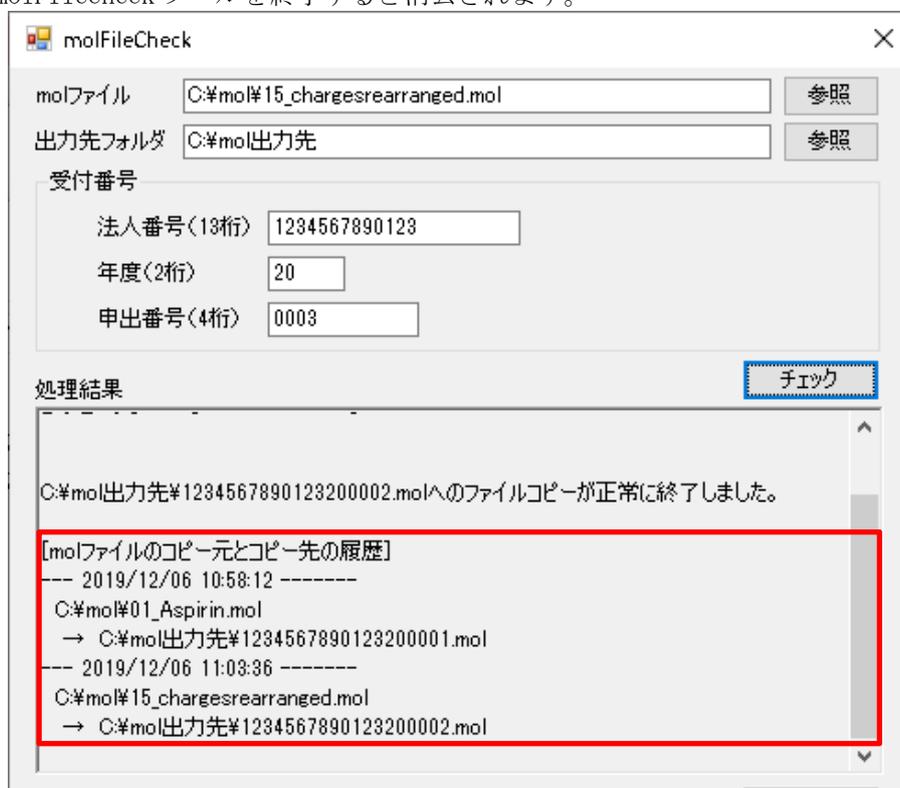
・チェック OK でメッセージ有り

チェック結果が OK の場合、出力先フォルダ内にファイル名が「受付コード.mol」の mol ファイルが作成されます。



・出力先フォルダ

チェック結果が OK の場合、mol ファイル欄で指定した mol ファイルのパスと、出力先フォルダ内に出力される「受付コード.mol」のファイルパスが、履歴として処理結果欄に記録されます。この履歴は molFileCheck ツールを終了すると消去されます。



チェック結果が Error の場合は処理結果の欄に Error 内容の詳細が出力されますので、その内容に沿って再度 mol ファイル等を設定しなおしてください。チェック結果が Error の場合、構造式画像は表示されません。

The screenshot shows the 'molFileCheck' application window. It has a title bar with a close button. The main area is divided into several sections:

- molファイル**: A text box containing 'C:\mol\16_isonotrecognized.mol' and a '参照' (Reference) button.
- 出力先フォルダ**: A text box containing 'C:\mol出力先' and a '参照' (Reference) button.
- 受付番号**: A section with three input fields: '法人番号(13桁)' with '1234567890123', '年度(2桁)' with '20', and '申出番号(4桁)' with '0003'.
- 処理結果**: A section with a 'チェック' (Check) button. Below it is a scrollable text area containing:
 - [molファイル] C:\mol\16_isonotrecognized.mol
 - [チェック結果] Error
 - [メッセージ] no InChI; Unknown element(s): S -
 - [molファイルのコピー元とコピー先の履歴]
 - 2019/12/06 10:58:12 -----
 - C:\mol\01_Aspirin.mol
 - C:\mol出力先\1234567890123200001.mol
 - 2019/12/06 11:03:36 -----
 - C:\mol\15_chargesrearranged.mol
 - C:\mol出力先\1234567890123200002.mol
- 構造式**: A section with a '構造式出力' (Structure Output) button.

・チェックが Error の場合

⑥ チェック結果が OK の場合、mol ファイルの構造式画像が表示されます。

molFileCheck

molファイル 参照

出力先フォルダ 参照

受付番号

法人番号(13桁)

年度(2桁)

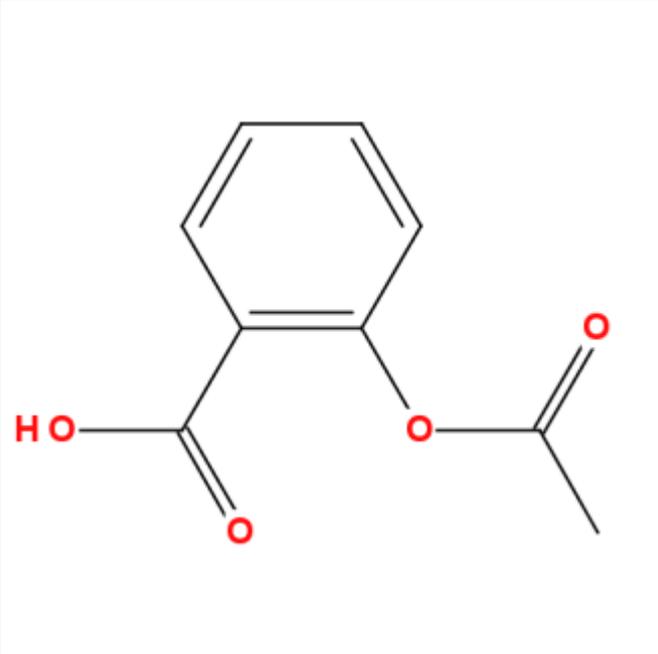
申出番号(4桁)

処理結果 チェック

[molファイル] C:\mol\01_Aspirin.mol
[チェック結果] OK
[メッセージ]
C:\mol出力先\1234567890123200001.molへのファイルコピーが正常に終了しました。

[molファイルのコピー元とコピー先の履歴]
--- 2019/12/06 10:58:12 -----
C:\mol\01_Aspirin.mol
→ C:\mol出力先\1234567890123200001.mol
--- 2019/12/06 11:03:36 -----
C:\mol\15_chargesrearranged.mol

構造式 構造式出力

CC(=O)Oc1ccc(cc1)C(=O)O

・チェック OK

構造式出力をクリックすると、出力先フォルダで選択したフォルダに受付コードをヘッダーにした構造式画像が出力されます。

The screenshot shows the 'molFileCheck' application window. At the top, there are input fields for 'molファイル' (C:\mol\01_Aspirin.mol) and '出力先フォルダ' (C:\mol出力先), each with a '参照' (Reference) button. Below these is a section for '受付番号' (Receipt Number) with fields for '法人番号(13桁)' (1234567890123), '年度(2桁)' (20), and '申出番号(4桁)' (0002). A 'チェック' (Check) button is located to the right of this section. The '処理結果' (Processing Result) area contains a log of operations, including a successful file copy from 'C:\mol\01_Aspirin.mol' to 'C:\mol出力先\1234567890123200001.mol'. A '構造式' (Structure) field displays the receipt number '123456789012320'. A '構造式出力' (Structure Output) button is visible on the right. A small dialog box is overlaid on the main window, displaying the message '構造式画像を出力しました。' (Structure image output completed) and an 'OK' button. In the background, the chemical structure of Aspirin is shown, featuring a benzene ring with a carboxylic acid group and an acetoxy group.

・構造式出力ボタンクリック後

管理 mol出力先

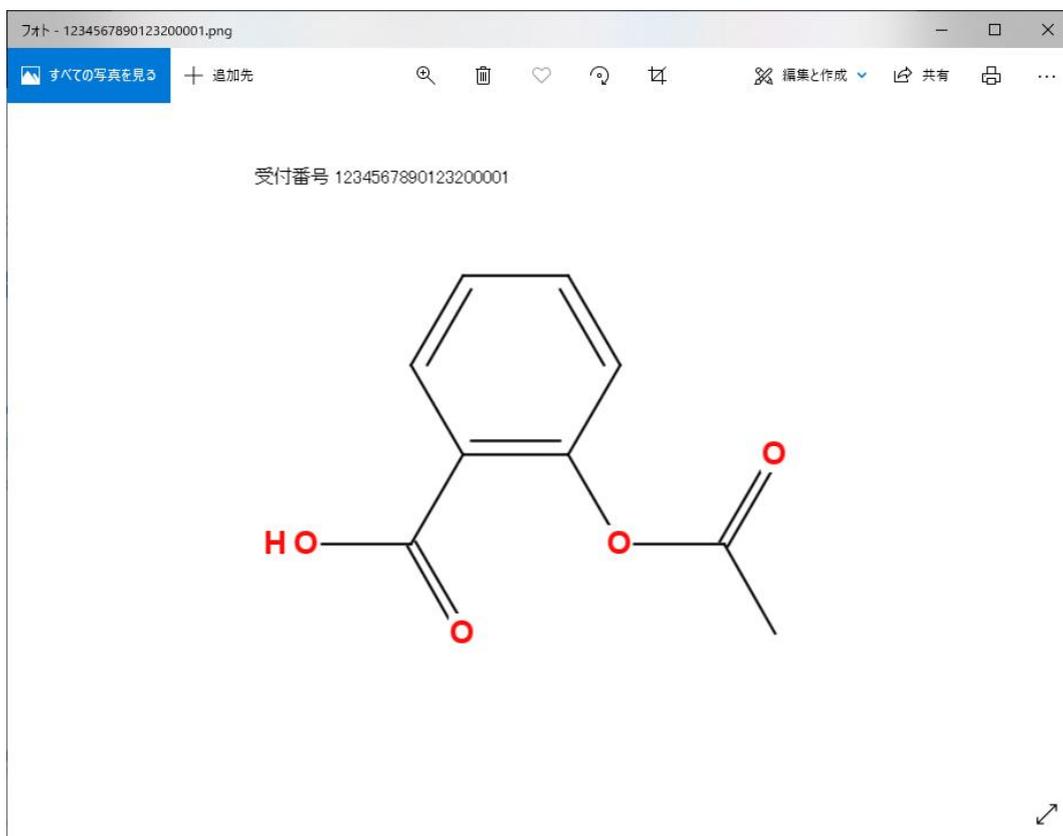
ファイル ホーム 共有 表示 ピクチャツール

← → ↑ ↓ PC > ローカル ディスク (C:) > mol出力先 mol出力先の検索

名前	更新日時	種類	サイズ
1234567890123200001	2018/10/03 11:58	MOL ファイル	1 KB
1234567890123200001	2019/12/06 11:15	PNG ファイル	12 KB
1234567890123200002	2019/11/05 17:35	MOL ファイル	2 KB

3 個の項目 | 1 個の項目を選択 11.5 KB

・出力先フォルダ



⑦ molFileCheck ツールを終了する際は右上の×ボタンを押下してください。

molFileCheck

molファイル 参照

出力先フォルダ 参照

受付番号

法人番号(13桁)

年度(2桁)

申出番号(4桁)

処理結果

[molファイル] C:\mol\01_Aspirin.mol
[チェック結果] OK
[メッセージ]
C:\mol出力先\1234567890123200001.molへのファイルコピーが正常に終了しました。

[molファイルのコピー元とコピー先の履歴]
--- 2019/12/06 10:58:12 -----
C:\mol\01_Aspirin.mol
→ C:\mol出力先\1234567890123200001.mol
--- 2019/12/06 11:03:36 -----
C:\mol\15_chargesrearranged.mol

構造式 1234567890123200001.mol

CC(=O)Oc1ccc(cc1)C(=O)O