

## VOC 排出インベントリにおける物質番号の見直し方法

### 1. 見直しの検討

#### (1) 見直しの経緯

平成26年度業務では、工業ガソリン4号(ミネラルスピリット)といった石油系混合溶剤等の成分別のVOC排出量を推計する方法を検討した。その結果、主な混合溶剤の種類ごとに、VOC成分への細分化比率(=VOC成分別の構成比)を設定することができた(表1)。

しかし、表1に示すとおり、新たに把握されたVOC成分には、過年度のVOC排出インベントリに含まれていなかったものが多数存在しており、数多くのVOC成分に新たにコード番号を付与する必要が生じた。

表1 石油系混合溶剤のVOC成分別構成比(例)

混合溶剤の種類		VOC成分別の構成比		
物質詳細コード	物質詳細名	物質詳細コード	物質詳細名	構成比
10002	工業ガソリン2号 (ゴム揮発油)	1005	n-ヘキサン	4.2%
		1007	シクロヘキサン	15.1%
		1008	ヘプタン	11.9%
		110002	オクタン	0.7%
		110017	2,4-ジメチルペンタン	0.7%
		110022	3-メチルヘキサン	5.4%
		110032	メチルシクロヘキサン	12.2%
		110033	メチルシクロペンタン	14.2%
		110049	2-メチルヘキサン	6.6%
			1,1-ジメチルシクロペンタン	0.6%
			シス-1,3-ジメチルシクロペンタン	3.9%
			トランス-1,3-ジメチルシクロペンタン	2.6%
			トランス-1,2-ジメチルシクロペンタン	3.4%
			エチルシクロペンタン	5.5%
		1100	その他(炭化水素系)	12.9%
	合計	100.0%		
10004	工業ガソリン4号 (ミネラルスピリット)	1002	キシレン	0.6%
		1004	1,3,5-トリメチルベンゼン	8.1%
		110009	1,2,4-トリメチルベンゼン	8.8%
			ノナン	5.7%
			3-メチルオクタン	0.2%
			デカン	9.9%
			2-メチルノナン	1.6%
			3-メチルノナン	1.8%
			ジメチルオクタン類	0.4%
			C10 アルカン	5.5%
			...	...
			C11 アロマティック	0.2%
1100	その他(炭化水素系)	19.2%		
	合計	100.0%		

注1: 過年度のVOC排出インベントリで扱われていなかったVOC成分は、「物質詳細コード」の欄を空欄とした。

注2: 過年度のVOC排出インベントリでは、「物質詳細コード」と称して桁数の異なったコード番号(本表では4桁~6桁)が混在している場合があるが、ここではそのままの表記とした。

注3: 工業ガソリン4号(ミネラルスピリット)はVOC成分の数が多いため、一部を「...」との表記で省略した。

## (2) 全面的な見直しが必要と判断した理由

数多くの VOC 成分に新たにコード番号を付与するためには、コード番号の付け方に「何らかのルール」が必要と考えられる。そのコード番号に関するルールは、過年度に作成された VOC 排出インベントリにおけるコード番号の付与と整合が取れている必要があるが、そこでのコード番号の付け方に関するルールが不明確である。

また、炭化水素系等の VOC 成分には以下のようなコード番号(物質詳細コード)が付与されているが(表 2)、網掛けで示す部分は実質的に使われておらず(常に”00”であるため)、6桁ものコード番号を付与する必然性に乏しく、コード番号として冗長な形となっている。

表 2 過年度の VOC 排出インベントリにおける物質コード付与の例

物質グループ		物質詳細コード	物質名
大分類	小分類		
1 炭化水素系	ア 主な物質	100100	トルエン
		100200	キシレン
		100300	エチルベンゼン
		100400	1,3,5-トリメチルベンゼン
		...	...
		100800	n-ヘプタン
	イ その他の物質	110002	オクタン
		110005	ベンゼン
		110006	スチレン
		110007	イソプロピルベンゼン
		...	...
		110000	その他(炭化水素系)
2 アルコール系	ア 主な物質	200100	メチルアルコール
		200200	エチルアルコール
		200300	イソプロピルアルコール
		200400	n-ブチルアルコール
		200500	iso-ブチルアルコール
	イ その他の物質	210002	n-プロピルアルコール
		210004	ブタノール
		210005	プロピルアルコール
		210006	2-アミノエタノール
		...	...
		210009	フェノール
		210008	その他(アルコール系)

注1: 過年度の VOC 排出インベントリの中で「小分類」という表記や区分はないが、ここでは初年度の VOC 排出インベントリ(平成 12・17 年度)の記述 ([https://www.env.go.jp/air/osen/voc/inventory/rep\\_h1903/01main.pdf](https://www.env.go.jp/air/osen/voc/inventory/rep_h1903/01main.pdf)) から読み取った内容として表記した。

注2: 本表に示す小分類は、それぞれ以下のものに対応している。

ア(主な物質): 初年度の VOC 排出インベントリで「主な推計対象物質」として列挙された物質(「その他の●●系」に該当するものを除く。)

イ(その他の物質): 各大分類に属する VOC 成分で、上記の「主な物質」に該当しないもの(翌年度以降の VOC 排出インベントリで VOC 成分として把握された物質)

注3: 物質グループ内の物質数が多い場合は、途中の物質を「...」と表記して省略した。

注4: 物質コードの中で、実質的に使われていないと考えられる(=常に”00”と表記されている)部分を網掛けで示す。

注5: 本表では炭化水素系とアルコール系のみ例示したが、他の大分類でも概ね同様の状況にある。

実際に付与された物質コードを見る限り、これらのコード番号は各大分類の中で以下のような方法で付与されたものと考えられる(表 3)。初年度の VOC 排出インベントリ(H12・H17)は、「主な物質」だけが特記された形で作成されており、その後新たな物質を追加するのに伴って「物質詳細コード」が追加され、主な物質については物質コードと物質詳細コードが混在する形となった。

表 3 過年度の VOC 排出インベントリにおける物質コードの付け方(原則)

小分類	物質詳細コードの付け方(原則)
ア 主な物質	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 大分類の番号を 1000 倍した値(炭化水素系なら”1000”)を基本となる数とする。</li> <li>● その基本となる数に対し、この物質グループ(小分類)中の n 番目の VOC 成分は n を加えた数(概ね 4 桁のコード番号)を物質コードとする。</li> <li>● その物質コードの末尾に”00”を追加した番号を物質詳細コードとする。</li> </ul> ※小分類の中の順番をどう決めたのかは不明
イ その他の物質	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 大分類の番号を 100000 倍した値(炭化水素系なら”100000”)に、さらに 10000 を加えた値(炭化水素系なら”110000”)を基本となる数とする。</li> <li>● その基本となる数に対し、この物質グループ(小分類)中の n 番目の VOC 成分は n を加えた数(概ね 6 桁のコード番号)を物質詳細コードとする。</li> </ul> ※小分類の中の順番をどう決めたのかは不明 ※この「その他の物質」には、概ね4桁で表記される「物質コード」は存在しない。

注1: 過年度の VOC 排出インベントリの中で「基本となる数」という定義や表記はないが、ここでは便宜的にそのように定義(かつ表記)した。

注2: 本表に示す形で「物質コード」と「物質詳細コード」が定義されているが、過年度の VOC 排出インベントリでは以下のような使われ方も存在しており、表記が統一されていない。

例1: 4桁のコード番号だが「物質詳細コード」と表記

例2: 6桁のコード番号だが「物質コード」と表記

例3: 6桁のコード番号を単に「コード」と表記

例4: 4桁と6桁のコード番号が混在したものを「物質詳細コード」と表記

さらに、過年度の VOC 排出インベントリの物質コード等には以下のような問題もあると考えられるため(表 4)、今回の石油系混合溶剤の細分化(=多数の VOC 成分に新たなコード番号を付与)と同時にこられの問題を解決し、合理的な物質コードに改めることが必要と考えられる。

表 4 過年度の VOC 排出インベントリにおける物質コード等に係るその他の問題

問題の区分	具体的な問題の例
物質グループの分け方	① 物質グループは階層構造になっておらず、その結果として、同じグループ内の物質の順番に明確な規則性が見られなくなっていること ② 物質グループ内に「小分類」が存在しているが、「当初からあった物質」と「後から追加された物質」で分けるのは、分け方として合理的ではないこと
物質番号付与の方法	① 同じ物質で物質コードと物質詳細コードが存在しており、それらの使い分けのルールが存在しないまま両者が混在していること ② コード番号が複雑なため(2種類の番号が存在/桁数が多い)、結果的に計算ミスや記載ミスが数多く発生してきたこと

## 2. 見直しに向けた基本的な方針

過年度の VOC 排出インベントリには前記のような問題があるため、今後作成する VOC 排出インベントリでは以下に示す考え方で物質(VOC 成分)の分類やコード番号付与を行い、VOC 成分別の排出量を合理的に示す形に改めることとしたい。

このような形で物質を分類し、コード番号付与のルールを明確化すれば、今後新たな物質を追加する必要が生じたとしても、コード番号の桁数を増加させることなく(又は2種類のコード番号を併用することなく)新たなコード番号の付与が可能になると考えられる。

表 5 物質グループ等の名称の見直し

問題点	見直しの方法(具体例)
① 「炭化水素系」や「ハロゲン系」で共に「系」と呼ばれているが、「系」の意味が曖昧である。	例1:「炭化水素系」→「炭化水素類」 例2:「ハロゲン系」→「含ハロゲン化合物」
② 「溶剤」とは用途を示すときの表現なので、物質の分類として使うのは不適當である。	「その他の単体溶剤」→「その他の純物質」 「石油系混合溶剤」→「石油系混合溶剤等の混合物」 ※「その他の物質」としなかったのは、別掲する「混合物」と対比するため

表 6 物質グループの再編成

問題点	見直しの方法(具体例)
① 物質グループが 10 区分になっており、その結果として物質コードが最大 5 桁(物質詳細コードが最大 7 桁)まで増える要因の一つになっている。	以下の物質を「その他の含酸素化合物類」として一つのグループとし、 <u>全体を 9 区分</u> とする。 <ul style="list-style-type: none"> <li>・エーテル類</li> <li>・グリコールエーテル類</li> <li>・フェノール類</li> <li>・アルデヒド類</li> <li>・その他の含酸素化合物</li> </ul> ※別掲する理由によりグリコール類は含まれない。
② <ul style="list-style-type: none"> <li>● 同じグループ内に多くの物質が含まれるが(特に炭化水素類)、その順番に明確な規則性が見られない。</li> <li>● 物質によってオキシダント生成能等に大きな差があるが、物質の順番がその差を反映したものになっていない。</li> </ul>	上記①に示す 9 区分を「大分類」とし、それぞれの物質グループを「小分類」に細分化する。 <炭化水素類の細分化の例> アルカン(パラフィン系) アルケン(オレフィン系) シクロアルカン(ナフテン系) …

表 7 別の物質グループへの移動

問題点	見直しの方法(具体例)
<p>① 一般的にフェノール類は「アルコール類」の一部とは分類されない。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● フェノールとクレゾールの2物質をアルコール類から除外</li> <li>● 上記2物質は「その他の含酸素化合物類」(→表 5)に移動</li> </ul>
<p>② グリコールは「2価アルコール」に該当するにも関わらず、アルコール類から独立して扱われている。(しかも1物質だけで)</p>	<p>エチレングリコールを「グリコール類」から「アルコール類」に移動</p> <p>※グリコール類という物質グループは廃止</p>
<p>③ 「その他の純物質」には雑多なものが混在しており、このままでは小分類の設定が困難である。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● ホルムアルデヒドは「その他の含酸素化合物」という物質グループに移動</li> <li>● 「その他の純物質」にあった残りの物質は「含●●物質」という小分類名とする。</li> </ul> <p>※ホルムアルデヒドを「含酸素化合物」として「その他の純物質」に残すことはできない(他にも多数あるため)。</p>
<p>④ 2-アミノエタノールが「アルコール類」に分類されているが、この物質だけ分子構造として窒素を含有しており、他のアルコール類と比べ異質なものである。</p> <p>※化学構造による分類よりも、「含●●化合物」に該当するか否かが他では優先されている。</p>	<p>2-アミノエタノールを「含窒素化合物」というグループに移動</p>
<p>⑤ 天然ガス成分(エタン、プロパン、ブタン等)は純物質ではないが「炭化水素系」と同じ物質グループに属している。</p> <p>※化学構造による分類よりも、「純物質/混合物」による分類が他では優先されている。</p>	<p>天然ガス成分(エタン、プロパン、ブタン等)は「石油系混合溶剤等の混合物」というグループに移動</p>

表 8 コード番号の付け方の見直し

	問題点	見直しの方法(具体例)
①	<ul style="list-style-type: none"> <li>● VOC 排出インベントリには約 160 物質<sup>(※)</sup>が含まれるが、それらに最大 7 桁のコード番号を付与するのは冗長である。</li> </ul> <p>※東京都調査<sup>1)</sup>の結果を用いて石油系混合溶剤等の成分の細分化をした場合</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● 「物質コード」と「物質詳細コード」という 2 種類のコード番号が使われていて、複雑化する要因になっている。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● すべての物質は、それが属する物質グループの小分類コード(→下記②で別掲)で始まる物質コードとする。</li> <li>● すべての物質を 6 桁の物質コードで表記する。</li> <li>● 物質コードは 1 種類とし、複数のコード番号を混在させない。</li> </ul>
②	<p>過年度の VOC 排出インベントリにおける物質コードは、最初の 1 桁目<sup>(※)</sup>を除き、その付与の方法に明確な規則性が見られない。</p> <p>※「石油系混合溶剤」と「特定できない物質」の場合は、以下の通り読み替える。 「最初の 1 桁目」 → 「最初の 2 桁目」</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 物質グループの大分類(→表 6)ごとに、それぞれ 1 桁の大分類コードを付与する。</li> <li>● 物質グループの小分類(→表 6)ごとに、それぞれ 2 桁の小分類コードを付与する。</li> </ul>
③	<p>過年度の VOC 排出インベントリにおける物質コードは、小分類の中では実質的な「通し番号」となっており、コード番号の付与に関するルールが存在していないと考えられる。</p>	<p>物質コードの 3～6 桁目についても、可能な限り「付与のルール」を明確化させる。</p> <p>&lt;例&gt;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 3～4 桁目は炭素数とする(例:n-ヘキサンなら 3～4 桁目は”06”)</li> <li>・ 3～4 桁目と同じ物質の中で、構造が単純なものから順に 5～6 桁目を付与する(通し番号として)。</li> </ul> <p>※これらは「原則」であって例外もある。 ※「構造が単純」か否かは主観的に判定する。</p>

<sup>1)</sup>石油系混合溶剤の成分組成調査(東京都環境科学研究所年報 2007)

### 3. 今後の VOC 排出インベントリにおける物質の分類方法(案)

前記のような見直しの方針に従い、さらに過年度の VOC 排出インベントリに含まれている物質の種類なども勘案し、今後の VOC 排出インベントリでは以下のような形で物質(VOC 成分)を分類し、年度ごとの VOC 排出量を推計・公表する形に改めることとしたい。

#### (1) 物質グループの設定

物質グループの大分類として9グループを設定した上で、それぞれに複数の小分類を設定し、2桁の小分類コードを付与する形としたい。各大分類における小分類設定の考え方は表9に示すとおりであり、それによって設定された物質グループを表10に示す。

表9 今後の VOC 排出インベントリにおける物質グループ設定の考え方(案)

大分類コード	大分類名	小分類設定の考え方(理由等)
1	炭化水素類	ア 炭化水素類には「アルカン」といった <u>一般的な分類方法が存在しており、それに従うのが分かりやすい。</u> イ 予備的な情報収集により、オキシダント生成能には「 <u>二重結合の有無</u> 」が <u>重要</u> との知見が得られているため、小分類でそれが区別されていることが望ましい。
2	エステル類	ア 炭化水素類と同様に二重結合の有無(飽和/不飽和)で分けるのが望ましい。 イ 炭化水素類の小分類との整合も考慮し、「鎖状」と「環状」に分けるのが望ましい。
3	ケトン類	(エステル類と同様)
4	アルコール類	ア 不飽和アルコールや環状アルコールは、あまり使用や排出が想定されない(例:ベンジルアルコールは排出量が推計されていない)。 イ 分類方法として「第●級」というものがあるが、多価アルコールも存在しているため、物質自体を単純に「第●級アルコール」と分類するのは困難。 ウ アルコール類の分類として「1価」、「2価」といった分け方であれば、物質自体の分類として使うことが可能
5	その他の含酸素化合物類	分子構造に基づく一般的な分類方法(例:エーテル類)が存在しており、それに従うのが分かりやすい。
6	含ハロゲン化合物	ア ハロゲンとして複数の物質が存在しているため、それらを区別するのが基本と考えられる。 イ 含塩素化合物の数が特に多いため、これはさらに二重結合の有無でも分けることが望ましい。
7	その他の純物質	該当する物質数は多くないので、含ハロゲン化合物との整合も考慮して「含●●化合物」として分類するのが自然である。
8	石油系混合溶剤等の混合物	一般的な分類名が存在しているものは、可能な限りその分類名に従うのが分かりやすい。
9	特定できない物質	小分類として細分化するのは困難である。

表 10 今後の VOC 排出インベントリにおける物質グループの設定(案)

大分類コード	大分類名	小分類コード	小分類名
1	炭化水素類	11	アルカン(パラフィン系)
		12	アルケン(オレフィン系)
		13	シクロアルカン(ナフテン系)
		14	シクロアルケン
		15	芳香族
		19	その他の炭化水素類
2	エステル類	21	鎖状エステル(飽和)
		22	鎖状エステル(不飽和)
		23	環状エステル(飽和)
		24	環状エステル(不飽和)
		29	その他のエステル類
3	ケトン類	31	鎖状ケトン(飽和)
		32	鎖状ケトン(不飽和)
		33	環状ケトン(飽和)
		34	環状ケトン(不飽和)
		39	その他のケトン類
4	アルコール類	41	1価アルコール
		42	2価アルコール(グリコール)
		43	3価アルコール
		49	その他のアルコール類
5	その他の含酸素化合物	51	エーテル類
		52	グリコールエーテル類
		53	フェノール類
		54	アルデヒド類
		59	その他の含酸素化合物
6	含ハロゲン化合物	61	含フッ素化合物
		62	含塩素化合物(飽和)
		63	含塩素化合物(不飽和)
		64	含塩素化合物(その他)
		65	含臭素化合物
		69	その他の含ハロゲン化合物
7	その他の純物質	71	含窒素化合物
		72	含硫黄化合物
		79	その他の純物質
8	石油系混合溶剤等の混合物	81	工業ガソリン
		82	規格の定まった混合物(別掲以外)
		83	類似の構造を持つ物質の混合物(別掲以外)
		89	その他の混合物
9	特定できない物質	90	特定できない物質

注1: 各大分類の末尾にある「その他の●●」は、小分類コードの2桁目を「9」で統一した。

注2: 炭化水素類とエステル類、ケトン類の場合、二重結合のあるもの小分類コードの2桁目が偶数になるよう設定した(したがって、小分類コードの「15」は欠番とした)。



## (2) 物質グループ内での物質コード設定のルール(原則)

前記のような形で物質グループ(小分類)に分けて 2 桁の小分類コードを付与した後、それぞれの物質グループ内で、さらに以下のような考え方に従って物質コードを付与し、小分類コードを含め 4 桁の物質コードとして付与することとしたい。

表 11 小分類の中での物質コード付与の原則(その1:炭化水素類)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5 桁目)付与の原則
11	アルカン (パラフィン系)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4 桁目は炭素数とする(例:炭素数が 6 なら"06")。</li> <li>● 3~4 桁目が同じ物質の中で、分子構造としての枝分かれの有無(数)やその結合位置などを考慮して、単純な物質から順に 5~6 桁目を付与する(通し番号)。</li> </ul> <例> 11-03-01 プロパン ← $C_3H_8$ 11-04-01 n-ブタン ← $C_4H_{10}$ (枝分かれなし) 11-04-02 イソブタン ← $CH(CH_3)_3$
12	アルケン (オレフィン系)	「11:アルカン(パラフィン系)」と同じ <例> 12-04-01 1-ブテン ← $CH_2=CHCH_2CH_3$ 12-04-02 cis-2-ブテン ← $CH_3CH=CHCH_3$ 12-04-03 trans-2-ブテン ← $CH_3CH=CHCH_3$ (トランス体)
13	シクロアルカン (ナフテン系)	「11:アルカン(パラフィン系)」と同じ <例> 13-05-01 シクロペンタン ← $C_5H_{10}$ 13-06-01 シクロヘキサン ← $C_6H_{12}$ (枝分かれなし) 13-06-02 メチルシクロペンタン ← $CH_3C_5H_9$
14	シクロアルケン	「11:アルカン(パラフィン系)」と同じ <例> 14-05-01 シクロペンテン ← $C_5H_8$
15	芳香族	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4 桁目は炭素数(ベンゼン環を含む) (例:トルエンは"07")。</li> <li>● 3~4 桁目が同じ物質の中で、官能基の種類や数、その結合位置などを考慮して、単純な物質から順に 5 桁目を付与する(通し番号)。</li> </ul> <例> 15-08-01 キシレン ← $C_6H_4(CH_3)_2$ 15-08-02 エチルベンゼン ← $C_6H_5CH_2CH_3$ 15-08-03 スチレン ← $C_6H_5CH=CH_2$ ※ここではベンゼン環(炭素数 6)を含む炭素数を示す。
19	その他の 炭化水素類	<ul style="list-style-type: none"> <li>● どうしても他に分類できない炭化水素類に限って"19"という小分類コードを設定する。</li> <li>● 付与の方法は具体的な事例が出てきてから検討する。</li> </ul>

注1:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。

注2:各分類に共通するルールとして、以下のような細則も設ける。

細則① 炭素数の指定ができない場合 → 3~4 桁目は"99"

細則② 小分類の中の物質の指定ができない場合 → 5~6 桁目は"99"

表 12 小分類の中での物質コード付与の原則(その 2:エステル類)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5桁目)付与の原則
21	鎖状エステル(飽和)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は炭素数とする。</li> <li>● 3~4桁目が同じ物質の中で、エステルを構成する酸(カルボン酸等)の種類に応じて、主要なものから順に5~6桁目を付与する(通し番号)</li> </ul> <例> 21-04-01 酢酸エチル ← $\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$ 21-05-01 乳酸エチル ← $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOCH}_2\text{CH}_3$ 21-06-01 酢酸ブチル ← $\text{CH}_3\text{COO}(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$
22	鎖状エステル(不飽和)	「21:鎖状エステル(飽和)」と同じ <例> 22-04-01 酢酸ビニル ← $\text{CH}_3\text{COOCH}=\text{CH}_2$
23	環状エステル(飽和)	基本的には「21:鎖状エステル(飽和)」と同じ。 ※但し、今のところ具体例なし
24	環状エステル(不飽和)	基本的には「21:鎖状エステル(飽和)」と同じ。 ※但し、今のところ具体例なし
29	その他のエステル類	<ul style="list-style-type: none"> <li>● どうしても他に分類できないエステル類に限って「29」という小分類コードを設定する。</li> <li>● 付与の方法は具体的な事例が出てきてから検討する。</li> </ul>

注:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。

表 13 小分類の中での物質コード付与の原則(その 3:ケトン類)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5桁目)付与の原則
31	鎖状ケトン(飽和)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は炭素数とする。</li> <li>● 3~4桁目が同じ物質の中で、分子構造としての枝分かれの有無(数)やその結合位置などを考慮して、単純な物質から順に5~6桁目を付与する(通し番号)。</li> </ul> <例> 31-03-01 アセトン ← $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ 31-04-01 メチルエチルケトン ← $\text{CH}_3\text{COC}_2\text{H}_5$ 31-06-01 メチルイソブチルケトン ← $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
32	鎖状ケトン(不飽和)	基本的には「31:鎖状ケトン(飽和)」と同じ。 ※但し、今のところ具体例なし
33	環状ケトン(飽和)	「31:鎖状ケトン(飽和)」と同じ。 <例> 33-06-01 シクロヘキサノン ← $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}$
34	環状ケトン(不飽和)	「31:鎖状ケトン(飽和)」と同じ。 <例> 34-09-01 イソホロン ← $\text{COCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$
39	その他のケトン類	<ul style="list-style-type: none"> <li>● どうしても他に分類できないケトン類に限って「39」という小分類コードを設定する。</li> <li>● 付与の方法は具体的な事例が出てきてから検討する。</li> </ul>

注:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。

表 14 小分類の中での物質コード付与の原則(その 4:アルコール類)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5桁目)付与の原則
41	1価アルコール	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は炭素数とする。</li> <li>● 3~4桁目が同じ物質の中で、分子構造としての枝分かれの有無(数)やその結合位置などを考慮して、単純な物質から順に5~6桁目を付与する(通し番号)。</li> </ul> <例> 41-02-01 エチルアルコール ← $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ 41-03-01 ノルマル-プロピルアルコール ← $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{OH}$ 41-03-02 イソ-プロピルアルコール ← $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$
42	2価アルコール(グリコール)	「41:1価アルコール」と同じ。 <例> 42-02-01 エチレングリコール ← $\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2$
43	3価アルコール	基本的には「41:1価アルコール」と同じ。 ※但し、今のところ具体例なし
49	その他のアルコール類	<ul style="list-style-type: none"> <li>● どうしても他に分類できないアルコール類に限って”49”という小分類コードを設定する。</li> <li>● 付与の方法は具体的な事例が出てきてから検討する。</li> </ul>

注:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。

表 15 小分類の中での物質コード付与の原則(その 5:その他の含酸素化合物)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5桁目)付与の原則
51	エーテル類	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は炭素数とする。</li> <li>● 3~4桁目が同じ物質の中で、単純な物質から順に5~6桁目を付与する(通し番号)。</li> </ul> <例> 51-02-01 エチレンオキシド ← $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ 51-06-01 ETBE(エチルターシャリ-ブチルエーテル) ← $\text{C}_2\text{H}_5\text{OC}(\text{CH}_3)_3$
52	グリコールエーテル類	「51:エーテル類」と同じ。 <例> 52-05-01 プロピレングリコールジメチルエーテル ← $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{OCH}_3$ 52-05-02 酢酸 2-メトキシエチル ← $\text{CH}_3\text{COO}(\text{CH}_2)_2\text{OCH}_3$
53	フェノール類	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は(ベンゼン環を含む)とする(原則)。</li> <li>● 3~4桁目が同じ物質の中で、官能基の種類、数、結合位置等を考慮して、単純な物質から順に5~6桁目を付与(通し番号)。</li> </ul> <例> 53-06-01 フェノール ← $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$ 53-07-01 クレゾール ← $\text{C}_6\text{H}_4(\text{OH})\text{CH}_3$
54	アルデヒド類	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は炭素数とする。</li> <li>● 3~4桁目が同じ物質の中で、単純な物質から順に5~6桁目を付与する(通し番号)。</li> </ul> <例> 54-01-01 ホルムアルデヒド ← $\text{HCHO}$
59	その他の含酸素化合物	基本的には「54:アルデヒド類」と同じ。 ※但し、今のところ具体例なし

注:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。

表 16 小分類の中での物質コード付与の原則(その 6:含ハロゲン化合物)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5桁目)付与の原則
61	含フッ素化合物	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は炭素数とする。</li> <li>● 炭素数が確定しない場合は、3~4桁目を”99”とする。</li> <li>● 3~4桁目と同じ物質の中で、ハロゲン原子の数等を考慮して、単純な物質から順に5~6桁目を付与(通し番号)。</li> </ul> <例> 61-02-01 テトラフルオロエチレン ← $\text{CF}_2=\text{CF}_2$ 61-99-99 その他のフッ素系工業用洗浄剤 ← 炭素数=不明
62	含塩素化合物(飽和)	「61:含フッ素化合物」と同じ。 <例> 62-01-01 クロロメタン ← $\text{CH}_3\text{Cl}$ 62-01-02 ジクロロメタン ← $\text{CH}_2\text{Cl}_2$
63	含塩素化合物(不飽和)	「61:含フッ素化合物」と同じ。 <例> 63-02-05 トリクロロエチレン ← $\text{ClCH}=\text{CCl}_2$ 63-02-06 テトラクロロエチレン ← $\text{CCl}_2=\text{CCl}_2$
64	含塩素化合物(その他)	「61:含フッ素化合物」と同じ。 <例> 64-99-98 ジクロロメタン/トリクロロエチレン/テトラクロロエチレン以外の塩素系化合物 ← 炭素数=不明
65	含臭素化合物	「61:含フッ素化合物」と同じ。 <例> 65-01-01 臭化メチル ← $\text{CH}_3\text{Br}$ 65-03-01 N-ブロモプロパン ← $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{Br}$
69	その他の含ハロゲン化合物	基本的には「61:含フッ素化合物」と同じ。 ※但し、今のところ具体例なし

注:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。

表 17 小分類の中での物質コード付与の原則(その 7:その他の純物質)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5桁目)付与の原則
71	含窒素化合物	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は炭素数とする。</li> <li>● 3~4桁目と同じ物質の中で、窒素原子の数等を考慮して、単純な物質から順に5~6桁目を付与(通し番号)。</li> </ul> <例> 71-02-01 2-アミノエタノール ← $\text{NH}_2(\text{CH}_2)_2\text{OH}$ 71-03-01 アクリロニトリル ← $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$
72	含硫黄化合物	概ね「71:含窒素化合物」と同じ(「窒素」を「硫黄」と読み替える)。 <例> 72-01-01 二硫化炭素 ← $\text{CS}_2$
79	その他の純物質	概ね「71:含窒素化合物」と同じ。 ※但し、今のところ具体例なし

注:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。

表 18 小分類の中での物質コード付与の原則(その 8:石油系混合溶剤等の混合物)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5桁目)付与の原則
81	工業ガソリン	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は常に”99”</li> </ul> <例> 81-99-01 工業ガソリン 2号
82	規格の定まった混合物(別掲以外)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 3~4桁目は常に”99”</li> <li>● 使われる頻度等を考慮して5~6桁目の数を設定する。</li> </ul> <例> 82-99-01 ソルベントナフサ(コールタールナフサ)
83	類似の構造を持つ物質の混合物(別掲以外)	「82:規格の定まった混合物(別掲以外)」と同じ。 <例> 83-99-01 ノルマル-パラフィン系
89	その他の混合物	「82:規格の定まった混合物(別掲以外)」と同じ。 <例> 89-99-02 シンナー等の混合溶剤

注:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。

表 19 小分類の中での物質コード付与の原則(その 9:特定できない物質)

小分類コード	小分類名	物質コード(3~5桁目)付与の原則
90	特定できない物質	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 原則として分類なし(3~4桁目は常に”99”)</li> </ul> <例> 90-99-99 特定できない物質

注:物質コードの中で炭素数を表す部分を網掛けで示す。