

# 少量新規化学物質 電算処理コード記載要領

《電算処理コード》

[illegible]

電算処理コードの構造コードに係る記載については、以下の要領に従い、記載して下さい。

## 共通事項

## 1 数値等の記入

記入枠は、C、H、O 及び原子番号以外の枠は各 1 枠であるので、記載する数字が 10 以上となる場合、「+」と記入する。

記載欄が 2 枠のものの記載する数字が 9 以下の場合は、右詰めで記載し、記載する数字が 100 以上の場合は、「++」と記載する。

構造式に各指標の該当部分がない場合は、「0」とは記載せず、**空欄のまま**とする。ただし、構造分類の「0」については、記載する。

## 2 高分子

構造式中における繰り返し単位 (l、m、n など) をすべて  $l = m = n = 1$  とし、また、一つの単量体における付加部分  $-( )_x-$  についても、 $X = 1$  として数を記載する。

高分子の末端が明らかに修飾され、かつ構造式にも末端が明記されている場合は、その末端部分の元素数も加えて計算して記載する。

なお、特に、7 類（有機縮合系高分子）の申出された構造式には、単量体を複数併記しただけのもの（繰り返し表示 l、m、n の無いもの）や、名称上、末端を明らかにしていないのに構造式では末端が明らかになっているもの、若しくは  $n = 1 \sim 1,000$  のように幅が広いものなど構造式の記載が不明確又は当該物質の存在が疑わしいものが見受けられることから、まず構造式を正確に確定した上で各指標の数を数えること。

### 3 低分子

低分子物質については、構造式の一部の付加数や結合数に幅があり、構造式を例えば－( )<sub>m</sub>～<sub>n</sub>－としている場合は、<sub>m</sub>～<sub>n</sub>のいずれか小さい方の数で各指標を数える。

○

## 各指標について

(用語、例示等について)

以下の説明に使用する用語、定義等は必ずしも学術上の厳密な用語等ではなく、本件限りのものである。

例示については、○印部分が各指標に該当するので、本説明文と対照されたい。ただし、例にあげた

構造式は理解を容易にするため模式的に示している。

## 1 構造分類

区分の番号については、別表第1構造分類表の類の番号を記載する。ただし、**0 類（有機化合物のオニウム塩及び付加塩）**については、対となる分子、イオンの一方が既存化学物質等である場合も、それらを含めた**全体の数**を数えて記載する。

また、**9 類（構造不明等化合物）**は、原料として用いる化合物の各指標についてそれぞれの数を記載する。

## 2 C

炭素の全数を記載する。構造式上、通常省略される環を構成する炭素も含める。記載する数字が9以下の場合は、右詰めで記載し、記載する数字が100以上の場合は、「++」と記載する。

## 3 鎖状第三・第四C（以下、第三・四Cとする。）

鎖状骨格の分岐を識別するための指標。

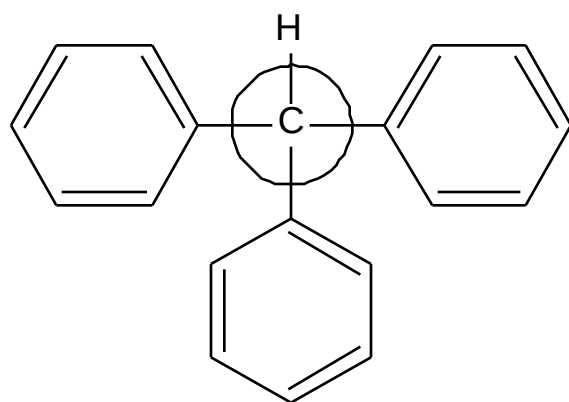
第三Cとは、別の3個の炭素と結合している炭素のことであり、第四Cとは、別の4個の炭素と結合している炭素である。当該第三C・第四Cが**鎖状部分にあるものについて数え**、総数を記載する。

縮合多環などのCのように環を構成している炭素はたとえ、第三・四Cであっても数える必要はない。

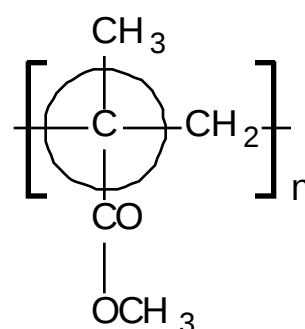
第三・四Cに結合している別の炭素には鎖状の炭素だけではなく、構造式上省略される環を構成している炭素の場合もある。この場合、例1に示すトリフェニルメタンの真ん中のCのようにCが1個の場合も鎖状として数える。従って、この場合、第三Cが1個あるので「1」と記載する。

該当する第三Cの場合は、別の炭素と二重結合しているものもある。ただし、三重結合はありえない。

高分子に係るものも、I - 2に従って数える。例2においては、末端に修飾が明らかに無いため繰り返し単位のみを $n = 1$ として数える。この場合、第三Cが1個あるので「1」と記載する。



例 1



例 2

## 4 H

水素の全数を記載する。構造式上、通常省略される水素も含める。記載する数字が9以下の場合は、右詰めで記載し、記載する数字が100以上の場合は、「++」と記載する。

## 5 O

酸素の全数を記載する。記載する数字が9以下の場合は、右詰めで記載し、記載する数字が100以上の場合は、「++」と記載する。

## 6 N

窒素の全数を記載する。記載する数字が 10 以上となる場合、「+」と記入する。

## 7 S

硫黄の全数を記載する。記載する数字が 10 以上となる場合、「+」と記入する。

## 8 F

フッ素の全数を記載する。記載する数字が 10 以上となる場合、「+」と記入する。

## 9 Cl

塩素の全数を記載する。記載する数字が 10 以上となる場合、「+」と記入する。

## 10 その他の元素 1・その他の元素 2

C、H、O、N、S、F、Cl 以外の全ての元素に対応する指標。

各々の**原子番号(別表第 2)**及びその総数を記載する。ここで、原子量ではないことに注意すること。

その他の元素が 1 種類の場合は、「その他の元素 1」の欄に原子番号と総数を記載する。総数が 10 以上となる場合、「+」と記入する。その他の元素が 2 種類以上の場合は、**必ず原子番号の大きな方から**「その他の元素 1」、「その他の元素 2」の順に記載する。

その他の元素が 3 種類以上の場合は、希ではあるが、と同様に原子番号の大きな方から 2 種類を記載する。3 種類目以降については省略する。例えば、原子番号 14 の Si が 4 個、原子番号 20 の Ca が 2 個、原子番号 11 の Na が 3 個の場合、「その他の原子 1」には 202、「その他の原子 2」には 144 と記載する。

## 11 最長メチレン直鎖のメチレンの数

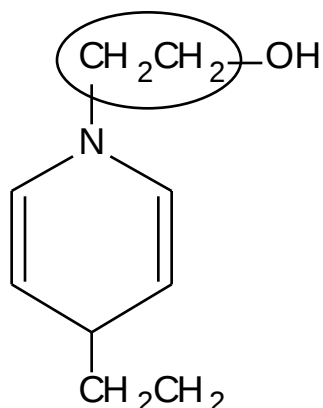
最も長いメチレン直鎖を構成するメチレンの数によって構造を識別するための指標。

メチレン直鎖とは、それが鎖状骨格部分であるか、環の側鎖であるかを問わず、分岐、置換基、不飽和結合及び他種の元素も介在せず、メチレン「 $\text{—CH}_2\text{—}$ 」のみが 1 個又は 2 個以上が直列に結合している直鎖構造部分をいう。したがって、**環を構成している「 $\text{—CH}_2\text{—}$ 」は該当しない。**

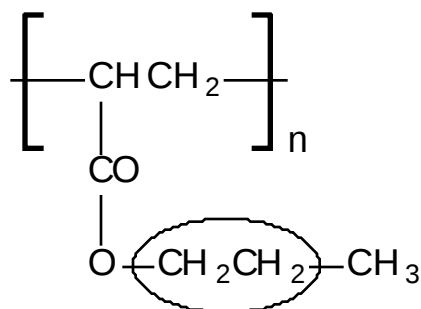
メチレン直鎖の両端に環、OH、COOH 等の特性原子団が結合していても当該メチレン直鎖のみに注目してメチレンの数を記載する。(例 3 上参照)

構造式中に 1 個のメチレン直鎖がある場合は、その直鎖を構成するメチレンの数を記載する。**2 個以上のメチレン直鎖がある場合は、最も長いメチレン直鎖のメチレンの数を記載する。**

例 3 では、2 個のメチレン直鎖があるが、上の直鎖にはメチレンが 2 個、下の直鎖には 1 個あるので「2」と記載する。ここで、メチル基「 $\text{CH}_3\text{—}$ 」はメチレンではないからエチル基「 $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—}$ 」のメチレンの数は 1 である。例 4 では、2 個のメチレン直鎖があるが、上の直鎖にはメチレンが 1 個、下の直鎖にはメチレンが 2 個あるので「2」と記載する。



例 3



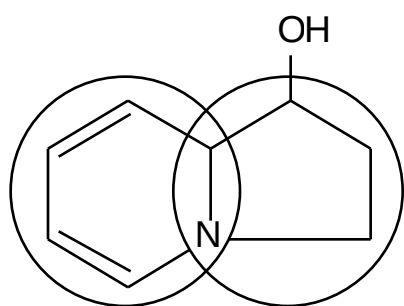
例 4

## 12 環

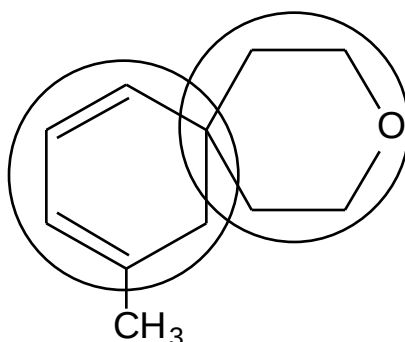
環の数によって構造を識別するための指標。

環とは、飽和環、不飽和環、炭化水素環、複素環、環の員数、置換基の数を問わず、縮合環(例 5 - 1) スピロ環(例 5 - 2)、架橋環(例 5 - 3) も 1 つずつ切り離して各々 1 個と数えた構造式中の全ての環(以下、「環」という。)をいい、その合計数を記載する。

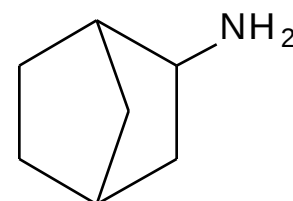
エポキシ構造(例 6 の右側部分)も三員複素環であり、該当する。よって、環の数は、例 5 - 1、5 - 2、5 - 3、及び例 6 のいずれの場合も「2」、例 7 の場合は「3」と記載する。(注：環の数を数える場合、当該化合物を切断して 1 つの鎖状化合物にするために必要な切れ目の最小の数と同数の環でできているものと見なす。)



例 5 - 1

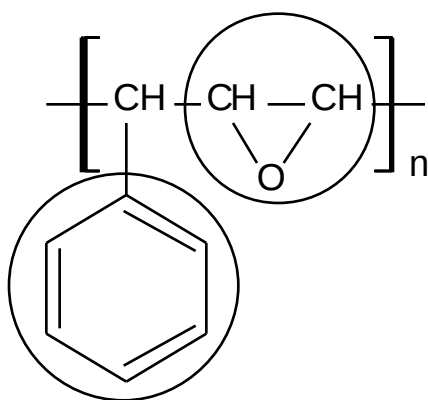


例 5 - 2

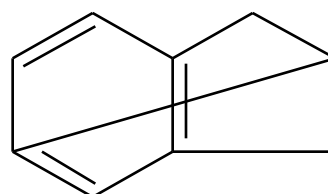


例 5 - 3

錯綜するので○は省略



例 6



例 7

錯綜するので○は省略

## 13 環の最多 C 開始鎖

環の C 開始側鎖の数により構造を識別するための指標。

「環の C 開始側鎖」とは、環に結合している C に始まる側鎖をいう。構造式中に環が 1 個ある場合は、その C 開始側鎖の数を記載する。2 個以上の環があり、各々に C 開始側鎖がある場合には、最多の C 開始側鎖を有する 1 個の環を選び、その C 開始側鎖の数を記載する。

「C に始まる」とは、環に結合している側鎖の最初の原子が C ということである。参考までに、C 開始側鎖と結合している環の原子の種類には無関係であり、拘束されない。

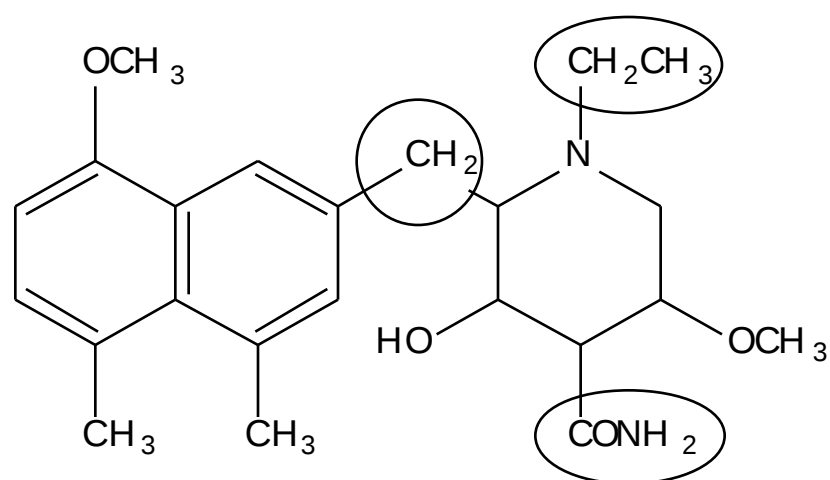
例 8 の右上部分、複素環の N 原子からの C 開始側鎖である。

いずれにせよ、C 以外の原子で始まる O、N など開始している側鎖は対象外であり、数える必要はない。

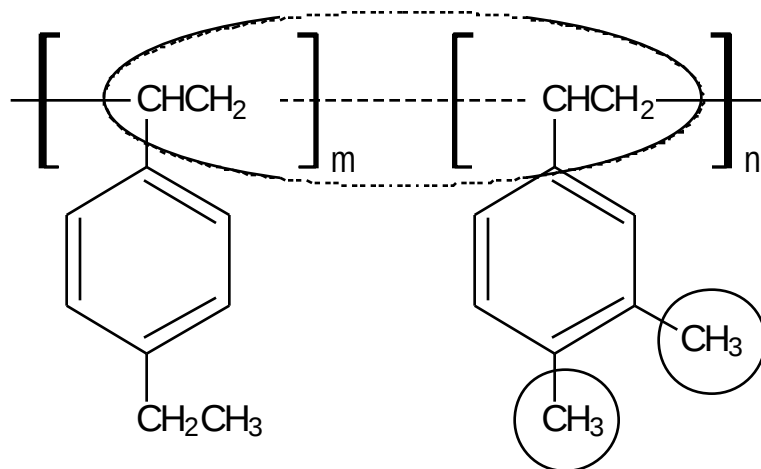
高分子の場合、例 9 上部分に示すような重縮合に関わる主鎖も環に結合している場合は該当する。

例えば、例 8 の場合、左環に 1 個、中央環に 2 個(「CH<sub>3</sub> -」、「- CH<sub>2</sub> -」)、右環に 3 個(「- CH<sub>2</sub> -」、「- CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>」、「- CONH<sub>2</sub>」)の C 開始側鎖があるから、「3」と記載する。

また、例 9 では、左環に 2 個、右環に 3 個であるから「3」と記載する。



例 8



例 9

## 14 C 直結 OH (含 COOH)

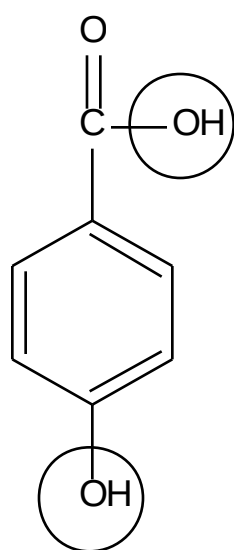
末端特性原子団である OH の数により構造を識別するための指標。

アルコール類、フェノール類の OH のほか、カルボン酸の OH など有機化合物の鎖状骨格、環、環側鎖及び特性原子団の C に結合しているすべての OH の数を記載する。(例 10 参照)

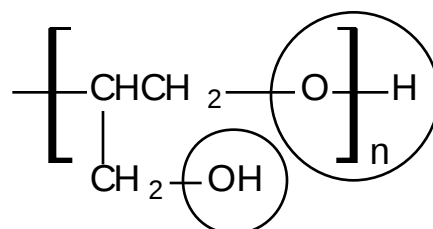
有機化合物の OH であっても、N など C 以外の原子に結合している OH は、対象外であり数える必要はない。

高分子において、末端を明らかに OH で修飾され、構造式に記載されている場合は数える。(例 11 の右上部分)

無機化合物の OH は、C に直結する OH を有していても によって、除外する。(例: NaHCO<sub>3</sub>)



例 10



例 11

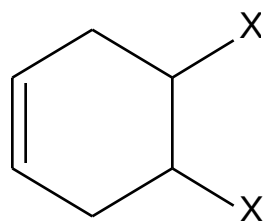
## 15 その他の原子団等

上記 1 ~ 14 の指標の記載の有無にかかわらず、申出物質が次のいずれかに該当する場合は、数を数えるものではなく、その種類の区分の番号を記載する。

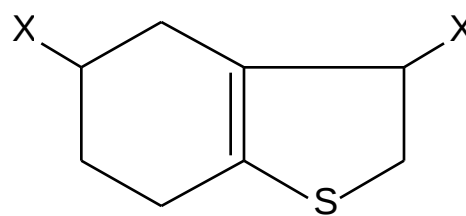
別表第 2 元素及び原子番号表の \* 欄に番号が記載されている元素を含有するものは、その該当する番号「1」又は「2」を記載する。

申出物質が、「多ハロゲン化環状化合物」である場合又は構造式の一部に当該構造を有している場合は、「3」と記載する。

「多ハロゲン化環状化合物」とは、環にハロゲン元素 (F、Cl、Br 及び I) を 2 個以上有しているもの。ここで、1 個の環にハロゲン元素を 1 個有しているものが複数存在して、それぞれが炭素鎖等で結合しているものは本化合物に該当する。(例 12、13 参照)



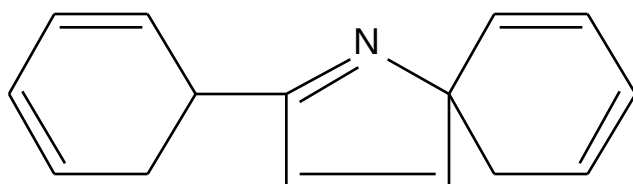
例 12



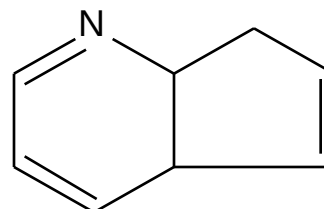
例 13

申出物質が「含窒素芳香族複素環化合物」である場合又は構造式の一部に当該構造を有している場合は、「4」と記載する。

「含窒素芳香族複素環化合物」とは、不飽和結合を複数有する環の骨格の一部に N を有しているものである。(例 14、15 参照)



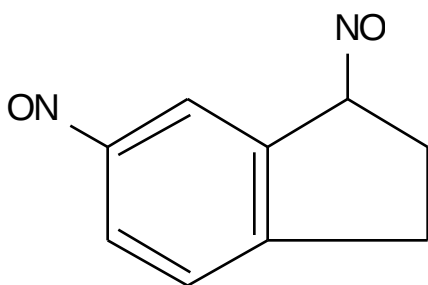
例 14



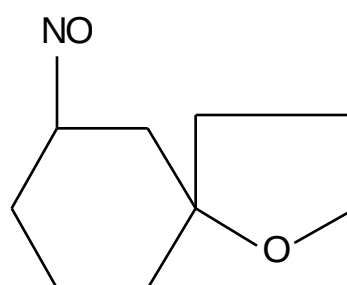
例 15

申出物質が「ニトロソ環状化合物」である場合又は構造式の一部に当該構造を有している場合は、「5」と記載する。

「ニトロソ環状化合物」とは、環にニトロソ基(—NO)が結合しているものである。(例 16、17 参照)



例 16



例 17

申出物質が、上記の「1」～「5」の2つ以上の区分に該当する場合は、「+」と記載する。

## 16 異性体

**6 員環**における置換基(置換基の数は2個又は3個に限る。)の位置関係及び光学異性体の有無によって構造を識別するための指標。

申出物質が **1 類(無機化合物)** **2 類(有機鎖状低分子化合物)** の場合及び **6 ~ 9 類(高分子等)** において **6 員環がない** 場合には、下記の(1)～(4)については記載の必要はない。

ただし、下記の(5)については、該当する場合には構造分類を問わず記載すること。

申出物質が次のいずれかに該当する場合は、その数ではなく、その種類の区分の番号を記載する。

(1) 構造式中に2個の置換基を有する6員環が1個ある場合

構造式中に2個の置換基(6員環の水素を置換した他の元素、側鎖、特性原子団等種類を問わず、かつ、**同じものでなくてもよい**。以下同じ。)を有する6員環(ベンゼン環のみとは限らない。以下同じ。)が1個ある場合は、次のいずれかに該当する番号を記載する。

イ) 2個の置換基が二隣接で結合しているものは、「1」と記載する。(例 18 参照)

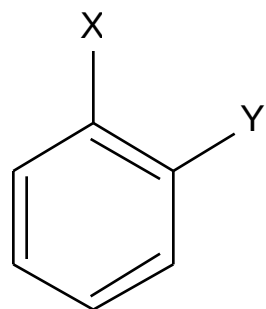
ロ) 2個の置換基が1間隔で結合しているものは、「2」と記載する。(例 19 参照)

ハ) 2個の置換基が2間隔で結合しているものは、「3」と記載する。(例 20 参照)

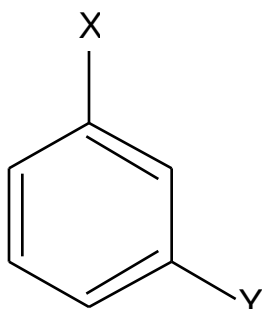
(2) 構造式中に2個の置換基を有する6員環が2個以上ある場合

ニ) 構造式中に6員環が2個以上あり、いずれも2個の置換基を有している場合、それらの置換基の関係がイ)、ロ)及びハ)と同じ位置関係にある場合、(1)にしたがって、それぞれ「1」、「2」、「3」の番号を記載する。

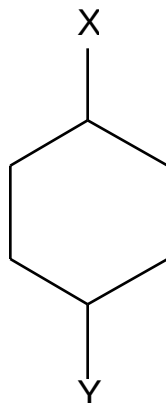
- ホ) 2 個の 6 員環が直結していない場合において、両方の 6 員環をつなぐ鎖部分も置換基と見なす。例えば、例 21 では、接点 Y と置換基 X は、それぞれの 6 員環において 1 間隔で結合しているので「2」と記載する。
- (3) 構造式中に 3 個の置換基を有する 6 員環が 1 個ある場合  
 構造式中に 3 個の置換基を有する 6 員環が 1 個ある場合は、次のいずれかに該当する番号を記載する。
- へ) 3 個の置換基が全隣接で結合しているものは、「4」と記載する。(例 22 参照)
- ト) 3 個の置換基のうち、2 個が隣接して 1 個が非隣接で結合しているものは、「5」と記載する。(例 23 参照)
- チ) 3 個の置換基がすべて非隣接のものは、「6」と記載する。(例 24 参照)
- (4) 「1」～「6」の 2 つ以上の区分に該当する場合は、「7」と記載する。(例 25 参照)
- (5) 同時に申出る「光学異性体」がある場合は、それぞれに「8」と記載する。
- (6) 上記の(1)～(4)のいずれかと(5)との両方に該当する場合は、「+」と記載する。



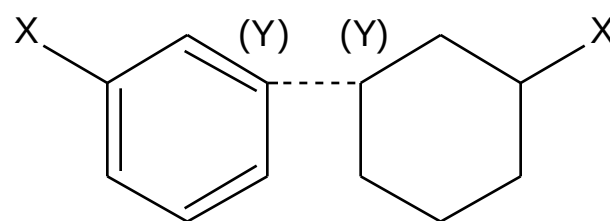
例 18



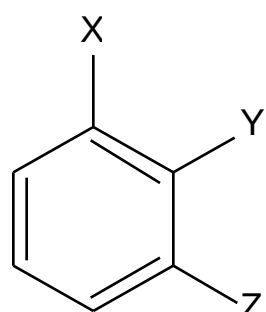
例 19



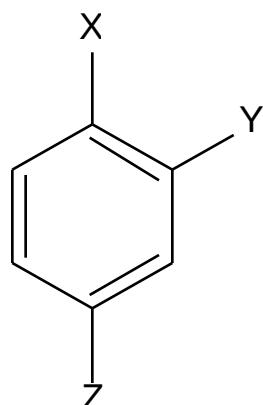
例 20



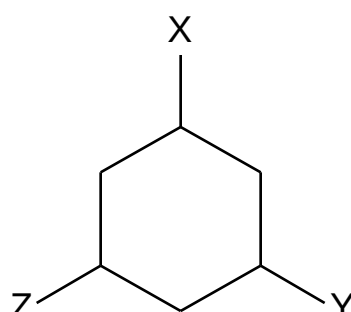
例 21



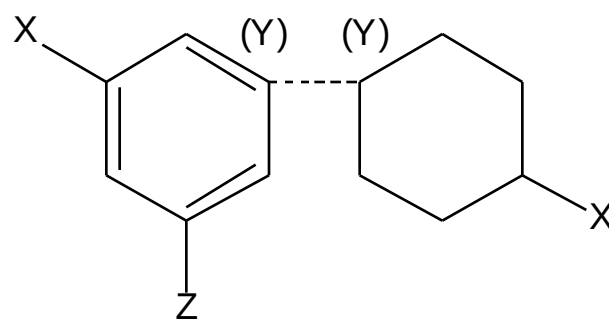
例 22



例 23

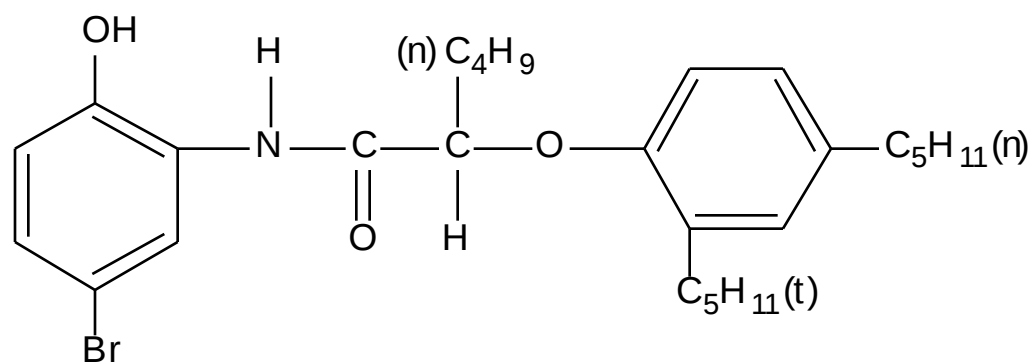


例 24

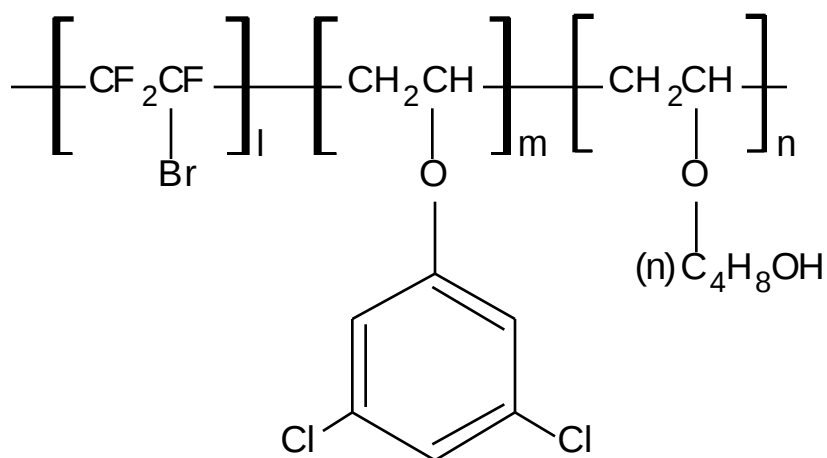


例 25

〔全指標の記載例〕



|      |   |          |   |   |   |   |   |     |             |   |             |   |                                  |   |                      |                        |                      |             |   |  |  |
|------|---|----------|---|---|---|---|---|-----|-------------|---|-------------|---|----------------------------------|---|----------------------|------------------------|----------------------|-------------|---|--|--|
| 3    | 2 | 8        | 1 | 4 | 0 | 3 | 1 |     |             |   | 3           | 5 | 1                                |   |                      | 4                      | 2                    | 2           | 1 |  |  |
| 構造分類 | C | 鎖状第三・第四C | H | O | N | S | F | C 1 | 原子番号        | 数 | 原子番号        | 数 | 最メ<br>長チ<br>メレ<br>チレ<br>ン数<br>鎖の | 環 | 環の<br>最多<br>C開<br>始鎖 | C(直<br>結<br>OOH<br>含H) | その<br>他の<br>原子<br>団等 | 異<br>性<br>体 |   |  |  |
|      |   |          |   |   |   |   |   |     | その他の元素<br>1 |   | その他の元素<br>2 |   |                                  |   |                      |                        |                      |             |   |  |  |



|      |   |          |   |   |   |   |   |     |             |   |             |   |                                  |   |                      |                        |          |     |  |   |   |   |
|------|---|----------|---|---|---|---|---|-----|-------------|---|-------------|---|----------------------------------|---|----------------------|------------------------|----------|-----|--|---|---|---|
| 6    | 1 | 6        |   | 1 | 8 |   | 3 |     |             | 3 | 2           | 3 | 5                                | 1 |                      |                        | 4        | 1   |  | 1 | 3 | 6 |
| 構造分類 | C | 鎖状第三・第四C | H | O | N | S | F | C 1 | 原子番号        | 数 | 原子番号        | 数 | 最メ<br>長チ<br>メレ<br>チレ<br>ン数<br>鎖の | 環 | 環の<br>最多<br>C開<br>始鎖 | C(直<br>結<br>OOH<br>含H) | その他の原子団等 | 異性体 |  |   |   |   |
|      |   |          |   |   |   |   |   |     | その他の元素<br>1 |   | その他の元素<br>2 |   |                                  |   |                      |                        |          |     |  |   |   |   |

