

安衛法と化審法に基づく新規化学物質の公示名称の命名法

1. 塩・エステルについて

- ①有機化合物については、字訳（IUPAC命名法で付した当該化学物質の英語名をカタカナで表記）とする。
- ②無機化合物の塩については、翻訳（IUPAC命名法で付した当該化学物質の英語名を日本語名で表記）とする。

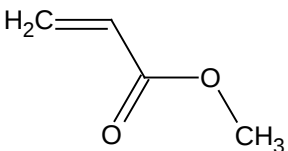
■詳細ルール

- ①有機化合物の構造（錯体の配位子を除く）を含む場合は、字訳とする。ただし、金属部分については、翻訳とする。
- ②無機酸の金属塩（有機化合物の構造を含まない塩）は、翻訳とする。
- ③錯イオンの塩は、有機配位子を含んでいても翻訳とする。

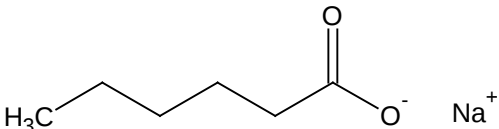
■具体例

- ①有機化合物の構造（錯体の配位子を除く）を含む場合（字訳）

・有機酸のエステル

構造式	
名称	methyl acrylate メチル＝アクリラート

・有機酸の金属塩

構造式	
名称	sodium hexanoate ナトリウム＝ヘキサノアート

・無機酸のエステル塩

構造式	$\text{Na}^+ \quad \text{O}^- - \text{S} \begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array} - \text{O} - \text{CH}_3$
名称	sodium methyl sulfate ナトリウム＝メチル＝スルファート

②無機酸の金属塩（翻訳）

構造式	$\text{Na}^+ \quad \text{O}^- - \text{S} \begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array} - \text{O}^- \quad \text{K}^+$
名称	potassium sodium sulfate 硫酸カリウムナトリウム

③錯イオンの塩（翻訳）

構造式	$\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$
名称	potassium hexacyanidoferrate(II) ヘキサシアニド鉄（Ⅱ）酸カリウム 又は potassium hexacyanidoferrate(4-) ヘキサシアニド鉄酸（４－）カリウム

2. 環状無水物について

1つの母体水素化物に2つ以上の酸が結合した化合物の分子内酸無水物の場合は、接尾辞「acid」を「anhydride」に置き換えるものとする。

■詳細ルール

①複数の環状無水物構造を有する場合

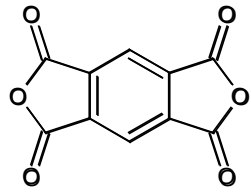
無水物を構成するカルボン酸の組み合わせごとに位置番号を並べて、「：」で区切る。

②環状無水物の他にカルボン酸基が存在する場合

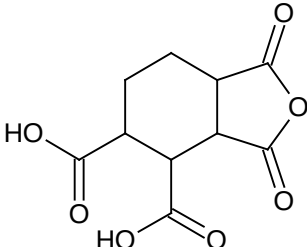
トリカルボン酸以上の酸（カルボン酸が主原子団のもの）の無水物で、遊離カルボン酸基を有する場合、元の（無水物ではない）遊離カルボン酸に対応した位置番号を付与する。さらに選択の余地がある場合は、カルボン酸を優先として小さい位置番号を振る。また、位置番号の前のスペースは「＝（つなぎ符号）」に置き換える。

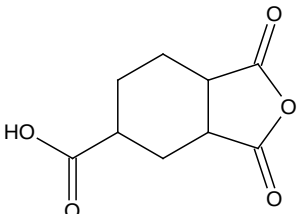
■具体例

①複数の環状無水物構造を有する場合

構造式	
名称	Benzene-1,2:4,5-tetracarboxylic acid dianhydride ベンゼン-1, 2 : 4, 5-テトラカルボン酸二無水物

②環状無水物の他にカルボン酸基が存在する場合

構造式	
名称	Cyclohexane-1,2,3,4-tetracarboxylic acid 3,4-anhydride シクロヘキサン-1, 2, 3, 4-テトラカルボン酸=3, 4-無水物

構造式	
名称	Cyclohexane-1,2,4-tricarboxylic acid 1,2-anhydride シクロヘキサン-1, 2, 4-トリカルボン酸=1, 2-無水物

3. イソシアナト（又はイソシアン酸）化合物について

母体水素化物名に下記の表の接頭辞を冠することとする（置換命名法）。

なお、イソシアナト（-NCO）基は置換命名法では接頭辞でのみ表され、接尾辞の主原子団にはならない。

	官能種類名	接頭辞
-CN	cyanide（シアン化） ^{注）}	cyano-（シアノ）

-NC	isocyanide (イソシアン化)	isocyano- (イソシアノ)
-OCN	cyanate (シアン酸)	cyanato- (シアナト)
-NCO	isocyanate (イソシアン酸)	isocyanato- (イソシアナト)
-ONC	fulminate (雷酸)	fulminato- (フルミナト)
-SCN	thiocyanate (チオシアン酸)	thiocyanato- (チオシアナト)
-NCS	isothiocyanate (イソチオシアン酸)	isothiocyanato- (イソチオシアナト)
-SeCN	selenocyanate (セレノシアン酸)	selenocyanato- (セレノシアナト)
-NCSe	isoselenocyanate (イソセレノシアン酸)	isoselenocyanato- (イソセレノシアナト)

注) -CN : cyanide シアニドは接尾辞 nitrile ニトリルを用いて置換命名法に基づき命名可能。

■具体例

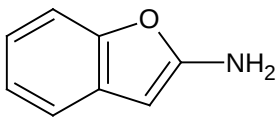
構造式	
名称	1, 5 - ジイソシアナトペンタン

4. 第一級アミンについて

「母体水素化物名+amine」とする。

■具体例

構造式	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-NH}_2$
名称	Ethanamine エタンアミン

構造式	
名称	1-Benzofuran-2-amine 1 - ベンゾフラン - 2 - アミン

5. 基名 (特に直鎖アルキル、シクロアルキル等) について

①結合している原子が1位の基の場合

母体水素化物名の語尾「-ane」を、接尾辞「-yl」、「-ylidene」、「-ylidyne」に変える。
結合する原子は末端にあり、位置番号は常に「1」になる (位置番号は省略)。この方法が推

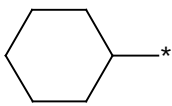
奨められるのは、飽和非環式・単環式炭化水素置換基、およびケイ素、ゲルマニウム、スズ、鉛、ホウ素の単核母体水素化物。

②結合している原子が1位でない基の場合

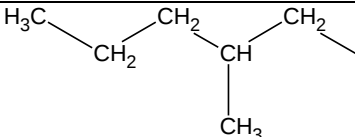
接尾辞を母体水素化物名の接尾辞「-ane」の末尾「e」をとって接尾辞「-yl」等を付ける。その際、「y」で始まる接尾辞の前では語尾「e」を除く。結合する原子の番号は、母体水素化物の番号付けに従い、なるべく小さい数にする。接尾辞「-ylidyne」を除き、位置番号「1」は必ず表記する。

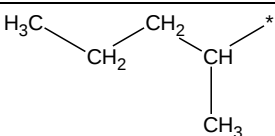
■具体例

①結合している原子が1位の基の場合

構造式	
名称	シクロヘキシル

②結合している原子が1位でない基の場合

構造式	
名称	2-メチルペンチル

構造式	
名称	ペンタン-2-イル

6. 高分子化合物（モノマーの順番）について

モノマーの名称を五十音順に並べるものとする。

7. アルキル基等の表記方法について

- ①複数種類のアルキルが混在する場合や、枝分かれ構造が特定できない場合など、構造に対応したアルキル基の名称を付与することが困難な場合には、「アルキル」とする。
- ②「アルキル」の後に炭素数の制限と枝分かれ構造の制限を入れて括弧で囲む。また、炭素数を制限する場合は、「C=10~20」のように数字の前に「=」を入れるものとする。

■具体例

『アルキル(C=O～O、分枝型)』

①アルキル基の炭素数:

- ・1種の場合は「C=12」
- ・範囲指定する場合は「C=O～O」
- ・偶数のみ等、アルキル基の炭素数が連続していない場合は「C=O, O」(カンマ区切り)

②枝分かれ構造の制限:

- ・直鎖のみの場合「直鎖型」
- ・枝分かれ構造のみの場合「分枝型」
- ・混在する場合「直鎖型及び分枝型」
- ・枝分かれ構造が不明の場合は制限を記載しない。

8. 混合物の表記方法について

構成成分を五十音順に並べ、末尾に「の混合物」をつける。構成成分をつなぐ言葉は「と」を用いるものとする。

例:『AとBとCの混合物』

また、主成分を限定する必要がある場合、主成分の名称の後に「(主成分)」をつけるものとする。

例:『AとB(主成分)とCの混合物』

9. 反応生成物の表記方法について

原料を五十音順に並べ、末尾に「の反応生成物」をつける。原料成分をつなぐ言葉は「と」を用いるものとする。

例:『AとBとCの反応生成物』

また、主生成物を限定する必要がある場合、反応生成物の名称前に、主生成物の名称を「○○を主成分とする、」としてつけ加えるものとする。

例:『Dを主成分とする、AとBとCの反応生成物』