

有機化学[2]

注

1. このクラスにおいては、下記の用語は以下に示す意味で用いる:

・“製造”は精製、分離、安定化または添加剤の利用を分類する独立した箇所がなければ、それらを包含する。

2. 化合物又は組成物からなる殺傷剤、有害生物忌避剤、有害生物誘引剤または植物成長調節剤は、サブクラス A01P にも分類される。

3. サブクラス C07C-C07K においては、ラストプレイス優先ルールが適用される、すなわち各階層レベルにおいて相反する指示のない限り、化合物は最後の適切な箇所に分類する。例えば、非環式鎖と複素環を含有する 2-ブチルピリジンは、複素環式化合物としてのみサブクラス C07D に分類する。一般に、グループ C07C59/58, C07C59/70 に記載されたような相反する指示がない限り、“非環式”または“脂肪族”という用語は、環をもたない化合物を示す。そしてもし環をもっている場合は、ラストプレイス優先ルールに従い、該当する分類上のグループがあるならば、環式脂肪族化合物または芳香族化合物のそれに分類する。化合物が互変異性体型で存在する場合には、他方の型が、分類体系のより前において特別に規定されていない限り、分類体系の最後の箇所に分類する。

4. 化学的に製造された化合物とその製法は、まず製造された化合物の型にしたがって分類し、ついで製造プロセスはもし重要ならば実施された反応の型に関する箇所にも分類する。このクラス以外でそのような箇所の例は以下のとおり:

C12P 所望の化学物質または組成物を合成するため、あるいはラセミ混合物から光学異性体を分離するために、発酵または酵素を用いる方法

C25B3/00 電気分解による有機化合物の製造

C25B7/00 電気泳動による化合物の製造

5. 二以上のメイングループに属する化合物群を製造する一般的过程の場合は、まず採用されたプロセスのグループが分類上存在するならば、それにしたがって分類し、ついで製造された化合物はもし重要ならばその型のグループにも分類する。

6. このクラスにおいては、相反する指示がないときは、カルボキシルまたはチオカルボキシル基を含有する化合物はラストプレイスルール（上記注（3）参照）が他の箇所を指示しない限り、カルボン酸またはチオカルボン酸の適切な箇所に分類する;カルボキシル基とは、その炭素原子がニトロまたはニトロソ基の窒素原子以外の異種原子に対する 3 個の結合をもち、4 個以上はもたず、同じ異種原子に対する少なくとも 1 個の多重結合をもつものであり、チオカルボキシル基とは、硫黄原子に対する少なくとも 1 個の結合をもつカルボキシル基であって、例. カルボン酸のアミドまたはニトリル、それらに対応する酸として分類する。

7. カルボン酸の無水物およびカルボン酸ハライドは他に掲示がない限り、対応する酸として分類する。化合物の塩は規定されていない限り、その化合物として分類する。例. 塩酸アニリンは炭素、水素および窒素のみを含有するものとして、C07C211/46 に分類される。、マロン酸ナトリウムはマロン酸として、C07C55/08 に分類される、またはメルカプチドはメ

ルカプタンとして分類する。金属キレートも同様に扱う。同様にして金属アルコラートおよび金属フェノラートは C07C に分類し、C07F には分類しない。すなわちアルコラートは、たとえば C07C31/28-C07C31/32 に、フェノラートは C07C39/235 または C07C39/44 に分類する。2 種以上の有機化合物相互間の塩、付加物または錯体はその塩、付加物または錯体を形成するすべての化合物について分類する。

有機化学の一般的方法あるいはそのための装置 (テロメリゼーションによるカルボン酸エステルの製造 C07C67/47; 高分子化合物の製造のための工程、例. テロメリ化 C08F, C08G)

注

(1) このサブクラスにおいては、導入された残基中にすでに存在していて、化学反応に本質的に関係のない官能基は、その化学反応の結果、形成または導入された官能基とはみなさない。

[4]

(2) このサブクラスにおいては、下記の用語は以下に示す意味で用いる:[4]

—“分離”は有機化合物の回収を目的とする分離のみを意味する。[4]

(3) このサブクラスに分類するとき、クロマトグラフィーに関係する一般分野の主題事項に関する限り、グループ B01D15/08 にも分類する。[8]

(4) このサブクラスにおいては、ラストプレイス優先ルールが適用される、すなわち各階層レベルにおいて相反する指示がない限り、化学反応の結果、形成された結合または導入された官能基に注目しつつ、用いられた反応の型に従って最後の適切な箇所に分類される。[4]

サブクラス内の索引

還元一般 31/00

酸化一般 33/00

異種原子含有官能基の形成または導入を伴わない反応.....

既に直接結合している炭素原子間の結合の型の変化 35/00 .

炭素-炭素結合の形成またはその切断 37/00.....

異種原子含有官能基の形成または導入を伴う反応.....

ハロゲン化 39/00

酸素含有官能基 41/00

窒素含有官能基 43/00

硫黄含有官能基 45/00

他の官能基 47/00

グリニャール反応 49/00

先行するいずれのグループにも包含されない、保護基または活性基の導入 51/00

不整合成 53/00

ラセミ化、反転 55/00

分離、精製、安定化、添加剤の使用 57/00, 63/00.....

同位元素の導入 59/00

有機遊離基の生成 60/00

他の一般的方法 61/00

31/00 還元一般[4]

33/00 酸化一般[4]

異種原子含有官能基の形成または導入を伴わない反応[4]

- 35/00 異種原子含有官能基の形成または導入を伴わない反応であって、既に直接結合している 2 個の炭素原子間の結合の型の変化を含むもの[4]
- 35/02 ・還元[4]
- 35/04 ・脱水素[4]
- 35/06 ・分解, 例. ハロゲン, 水またはハロゲン化水素の脱離[4]
- 35/08 ・異性化[4]
- 37/00 異種原子を含有する官能基の形成または導入を伴わない反応であって、直接結合していない 2 個の炭素原子間の炭素-炭素結合の形成または直接結合している 2 個の炭素原子の結合の切断を含むもの[4]
- 37/02 ・付加[4]
- 37/04 ・置換[4]
- A C-H→C-C
- B C-X→C-C
- C C-O→C-C
- Z その他
- 37/06 ・分解, 例. 二酸化炭素の脱離[4]
- 37/08 ・異性化[4]
- 37/10 ・環化[4]
- 37/12 ・・ディールス・アルダー反応[4]

異種原子含有官能基の形成または導入を伴う反応[4]

- 39/00 ハロゲン化[4]
- A ハロゲン化一般
- B フッ素化
- C 塩素化
- D 臭素化
- E ヨウ素化
- Z その他 [←2 種のハロゲンの同時導入, C-X 結合も同時に形成されるハロアルキル化]
- 41/00 酸素含有官能基の形成または導入[4]
- 41/02 ・水酸基または O-金属基の[4]
- A 芳香環に直結した OH 基, OM 基
- B C-C 結合の生成を伴うもの [芳香環に直結した OH, OM→A]
- Z その他
- 41/04 ・エーテル基, アセタール基またはケタール基の[4]
- 41/06 ・カルボニル基の[4]
- A アルデヒド基

- B カルボン酸, その誘導体によるアシル化 [←Friedel-Crafts アシル化]
- C 酸化によるもの [A が優先]
- D ・酸素以外の酸化剤によるもの
- Z その他
- 41/08 ・カルボキシル基, またはそれらの塩, ハロゲン化物もしくは無水物の[4]
- 41/10 ・・カルボキシル基の塩, ハロゲン化物または無水物[4]
- 41/12 ・カルボン酸エステル基の[4]
- 41/14 ・ペルオキシ基またはヒドロペルオキシ基の[4]
- 43/00 窒素含有官能基の形成または導入[4]
- 43/02 ・ニトロ基またはニトロソ基の[4]
- 43/04 ・アミノ基の[4]
- 43/06 ・アミド基の[4]
- 43/08 ・シアノ基の[4]
- 43/10 ・イソシアネート基の[4]
- 45/00 硫黄含有官能基の形成または導入[4]
- 45/02 ・スルホ基またはスルホニルジオキシ基の[4]
- 45/04 ・スルホニル基またはスルフィニル基の[4]
- 45/06 ・メルカプト基またはスルフィド基の[4]
- 47/00 官能基の形成または導入であって、グループ C07B39/00-C07B45/00 までに分類されないもの[4]

- 49/00 グリニヤール反応[4]
- 51/00 保護基または活性基の導入であって、グループ C07B31/00-C07B49/00 に分類されないもの[4]
- A 保護基・保護方法
- B ・OH 基
- C ・COOH 基
- D ・NH₂ 基
- E ・その他の官能基
- F 脱保護方法
- G 活性基・活性化方法
- Z その他
- 53/00 不整合[4]
- A 不整原子または分子不整の生成
- B ・不整原子または分子不整をもつ触媒を用いるもの
- C ・不整原子または分子不整をもつ反応試剤を用いるもの
- D ・光反応によるもの
- E ・その他の手段によるもの
- F 不整原子を含む結合の切断, 生成で不整原子または分子不整が新たに生成しないもの
- G 不整原子を含む結合の切断, 生成の起こら

	ないもの〔←立体配置保持合成〕		収〕〔←ストリツピング〕
Z	その他	H	固－気処理〔←昇華, 固体による気体の吸着〕
55/00	ラセミ化; 完全反転または部分反転[4]	Z	その他の方法
A	ラセミ化	63/02	・化学的変化をひきおこす処理によるもの[4]
B	反転	A	イオン交換
Z	その他	B	包接化合物の生成を利用するもの
57/00	光学活性有機化合物の分離[4]	C	塩の生成を利用するもの〔←キレート化〕
310	・一般	D	還元剤処理
320	・炭化水素	E	・水素
330	・ハロゲン含有化合物	Z	その他〔←酸処理, アルカリ処理, pH 調整, 電気透析〕
340	・酸素含有化合物〔←エーテル, ケトン, エステル, オキシラン〕	63/04	・添加剤の使用[4]
343	・・アルコール, フェノール		
346	・・カルボン酸		
350	・窒素含有化合物〔←含窒素複素環〕〔ラクタム, イミド→370〕		
360	・・アミン〔←ヒドロキシアミン, そのエーテル, エステル〕		
365	・・アミノ酸		
370	・・カルボン酸アミド〔→ラクタム, イミド, ペプチド〕		
380	・硫黄含有化合物		
390	・B, Si, P 化合物, 有機金属化合物		
59/00	有機化合物中への同位元素の導入[4]		
60/00	有機遊離基の生成[2011. 01]		
61/00	他の一般的方法[4]		
A	化学反応方法		
B	・化学的手段によるもの〔←反応試剤, 溶媒の選択〕〔触媒反応→C07B61/00 300〕		
C	・物理的手段によるもの〔←装置, プロセス, その組合せ〕		
D	・その他の手段によるもの〔←光, 音, 磁場, 原子核変換〕		
E	物理的変化を目的とする方法〔←物質の状態の変化〕		
Z	その他の方法〔←命名法, コンピュータケミストリ〕		
300	・触媒反応		

精製; 分離; 安定化[4]

63/00	精製; 有機化合物回収の目的のために特に適用した分離（光学活性有機化合物の分離 C07B57/00）; 安定化; 添加剤の使用[4]
A	蒸留〔←パーペーパレーション, 抽出蒸留〕
B	液－液処理〔←抽出〕
C	・超臨界抽出
D	固－液処理〔←濾過〕
E	・結晶化, 結晶の精製〔←晶析〕
F	・吸着〔←クロマト〕
G	気－液処理〔←凝縮, 液体による気体の吸