

CAS SciFinder®

# 塩・配位化合物の検索

化学情報協会 情報事業部  
2025/03

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



## 目次

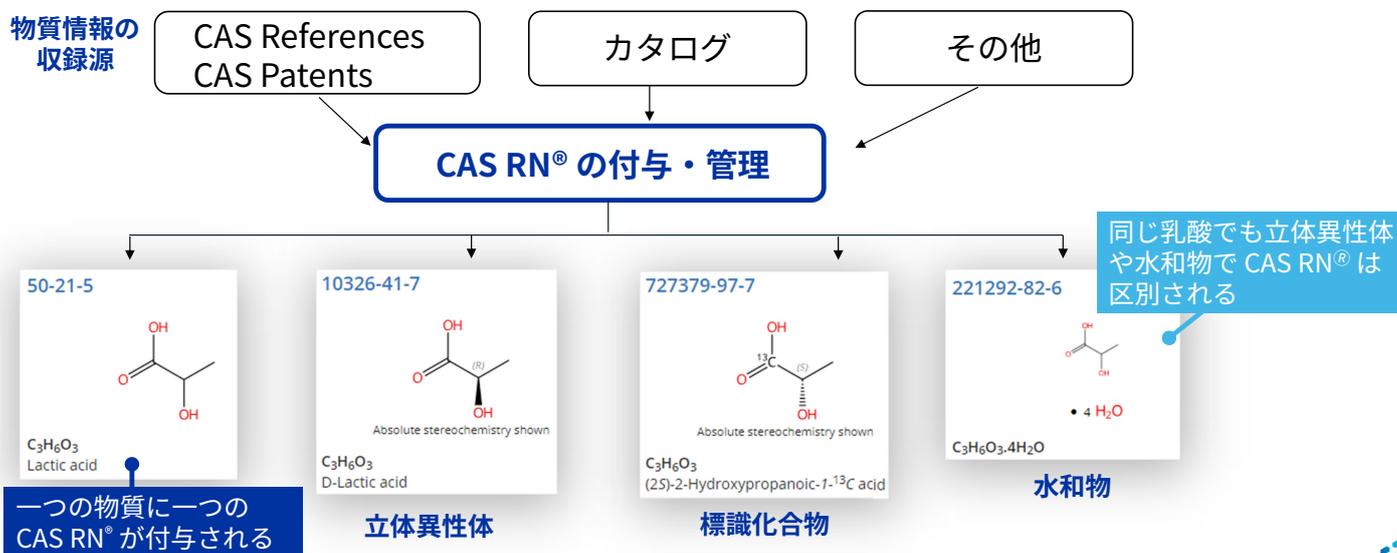
- CAS SciFinder の物質情報
- 塩の登録
- 塩の検索
- 配位化合物の登録
- 配位化合物の検索
- 検索例



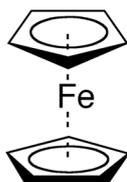
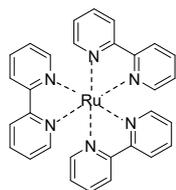
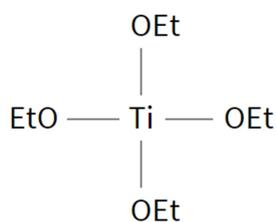
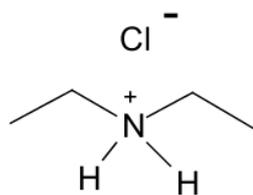
# CAS SCIFINDER の物質情報

## CAS REGISTRY - 物質情報

CAS SciFinder の物質情報は CAS 登録番号 (CAS RN<sup>®</sup>) で管理される



# CAS SciFinderで塩や配位化合物はどのように登録される？



5

© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



## 塩の登録

6

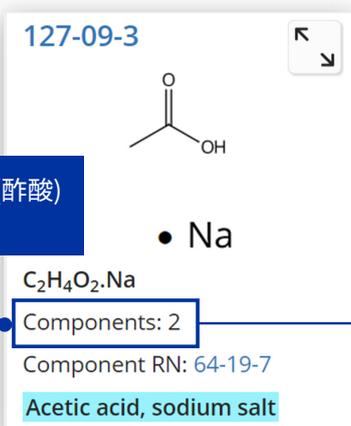
© 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



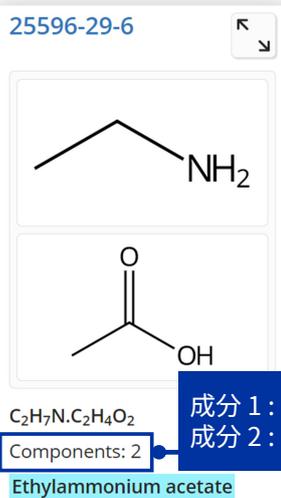
# 塩の登録

大部分の塩は、多成分物質として収録される

成分 1: 遊離の酸 (酢酸)  
成分 2: 金属 (Na)



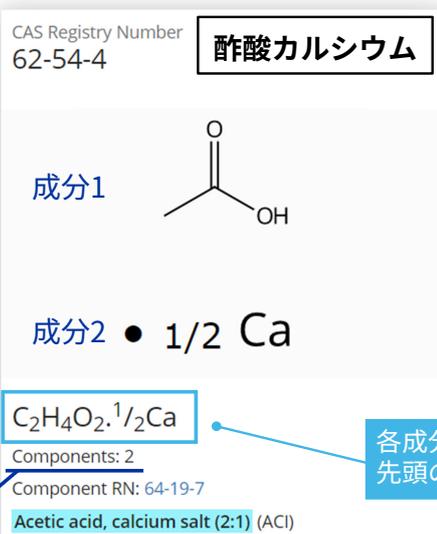
成分数



成分 1: 中性の塩基 (エチルアミン)  
成分 2: 中性の酸 (酢酸)

# 多成分物質とは

複数の成分から構成される物質



2成分で構成

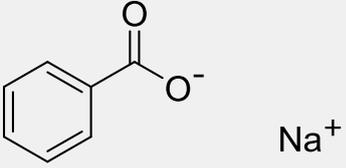
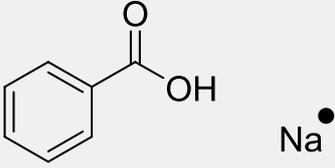
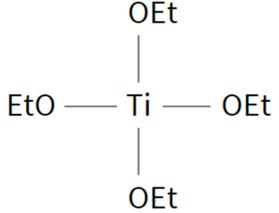
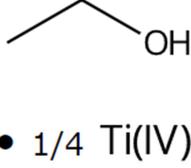
## <有機物質の分子式のルール>

- ① 有機成分を優先
- ② 炭素数の多い成分優先
- ③ 炭素数が同じ場合は、水素数の多い成分優先
- ④ 炭素、水素数が同じ場合は、他の元素のアルファベット順

各成分の分子式がピリオドで区切られている  
先頭の成分の係数が 1

## 塩の登録ルール (1) 金属塩\*

「フリーの有機成分+金属」の多成分物質で登録が原則

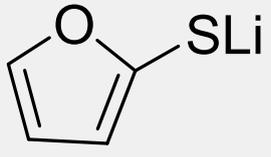
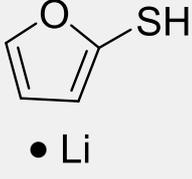
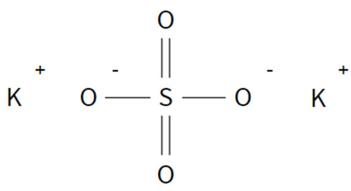
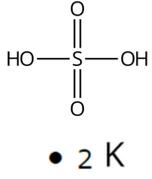
研究者のイメージ	実際の登録
	
	

有機成分が1種類の場合は多成分物質として登録され、2種類以上の場合は単成分として登録される (スライド 11 参照)

\* O, S, Se, Te, N, P, As に結合した水素が金属に置換されて生成した塩

## 塩の登録ルール (1) 金属塩\*

「フリーの有機成分+金属」の多成分物質で登録が原則

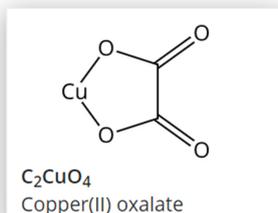
研究者のイメージ	実際の登録
	
	

\* O, S, Se, Te, N, P, As に結合した水素が金属に置換されて生成した塩

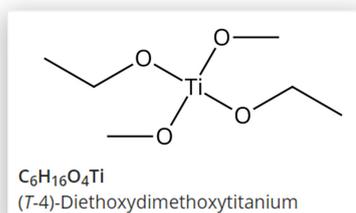
# 塩の登録ルール (1) 金属塩の例外

「単成分」での登録

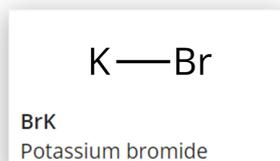
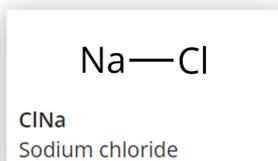
– 例外1：環状構造



– 例外2：有機成分が2種類以上



– 例外3：定義\*外

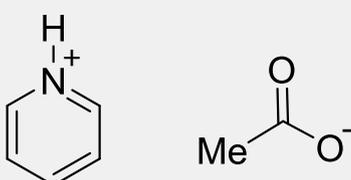
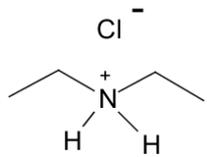
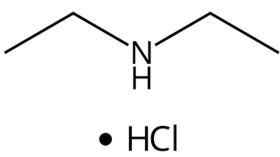


\*O, S, Se, Te, N, P, Asに結合した水素が金属に置換されて生成した塩

# 塩の登録ルール (2) 金属塩以外

多成分物質で登録が原則

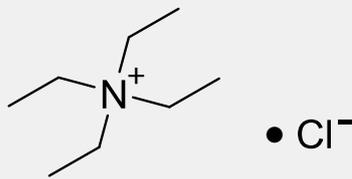
– 第1～3級アミン塩・ピリジニウム塩：中性の酸、中性の塩基

研究者のイメージ	実際の登録
	
	

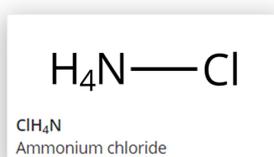
# 塩の登録ルール(2) 金属塩以外

多成分物質で登録が原則

- オニウム塩（第4級アンモニウム塩など）：オニウムイオン+アニオン

研究者のイメージ	実際の登録
$\text{Et}_4\text{N}^+ \text{Cl}^-$	

- 単成分で登録  
例外：塩化アンモニウム

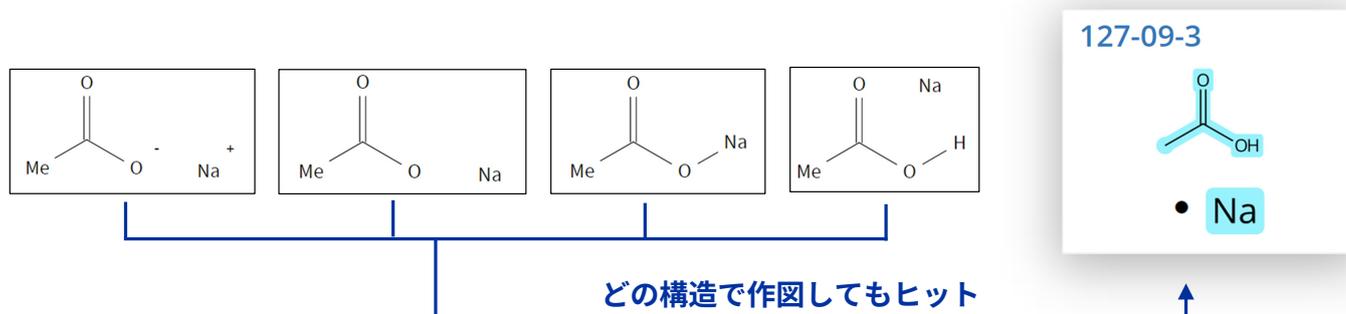


## 塩の検索

# 塩の検索 (1/3)

登録ルール通りに作図しなくても、目的の塩は検索できる

CAS SciFinder では作図した構造を幅広く解釈し、目的の塩がヒットする



- 電荷は指定しなくてよい
- 陰イオンと陽イオンの割合は指定しなくてよい

# 塩の検索 (2/3)

便利なフィルター

- Number of Components フィルター  
成分数を限定できる

Number of Components

- 1 (10K)
- 2 (30K)
- 3 (3,776)
- 4 (907)
- 5 or more (506)

- Substance Class フィルター  
物質の種類で限定できる

多成分物質の塩は  
Salt and Compound With  
で限定できる

Substance Class

- Salt and Compound With (26K)
- Organic/Inorganic Small Molecule (10K)
- Coordination Compound (7,593)
- Polymer (1,679)
- Incompletely Defined Substance (171)

[View All](#)

\*\*\* 注意点 \*\*\*

- 単成分の塩は Organic/Inorganic Small Molecule に分類され、Salt and Compound With に含まれない
- Salt and Compound With には塩以外にも含まれる

# 塩の検索 (3/3)

様々な検索方法が利用できる

## CAS SciFinder の物質情報

- CAS RN®
- 化学物質名称
- 化学構造
- 分子式
- 成分 CAS RN®

Screenshot of the CAS SciFinder search interface. The search bar contains "Sodium acetate". Below the search bar, two search criteria are listed: "Molecular Formula - C2H4O2.Na" and "Component RN - 64-19-7". A chemical structure of sodium acetate is shown on the right.

# 名称検索 – 検索画面

酢酸ナトリウム (Sodium acetate) を検索する

– 入力した物質名は完全一致で検索される

Screenshot of the CAS SciFinder search interface. The search bar contains "Sodium acetate". Below the search bar, a blue box highlights the search criteria "物質名で検索". Below the search bar, there are three search options: "Retrosynthetic Analysis", "Search CAS Lexicon", and "Search CAS Sequences".

# 名称検索 - 回答一覧

物質名で検索した場合、検索対象は「名称」と「Notes」

The screenshot shows the CAS Substances search interface for "Sodium acetate". The search results are displayed in a grid format. The first result (127-09-3) shows the chemical structure of sodium acetate and its components. The second and third results (82029-03-6 and 82028-75-9) show notes for "Sodium (alkylamido) acetate" and "Sodium (alkylamido) acetate flotation reagent (Russian)". A box labeled "Notes\* でヒット" points to the notes in the second and third results. A blue box labeled "物質名でヒット" points to the name "Sodium acetate" in the first result. The interface includes filters for Reaction Role and Reference Role, and options for sorting and viewing results.

\*Notes：索引者が集めた情報や定義

# 分子式検索 - 検索画面

分子式が  $C_2H_4O_2.Na$  である物質を検索する

– 各成分の分子式はピリオドで区切る

The screenshot shows the CAS search interface. The search bar contains the molecular formula  $C_2H_4O_2.Na$ . A yellow box highlights the search bar and a button labeled "分子式で検索". Below the search bar, there are three main search options: Retrosynthetic Analysis, Search CAS Lexicon, and Search CAS Sequences. The interface includes navigation tabs for Substances, Reactions, References, and Suppliers, and a "For You" section with a "NEW" badge.

# 分子式検索 - 回答一覧

分子式で検索した場合、標識化合物や構造異性体も回答に含まれる

Substances search for "C2H4O2.Na" Molecular Formula

Filter Behavior: Filter by Exclude

Search Within Results

Reaction Role: Product (21), Reactant (18), Reagent (6), Catalyst (2), Solvent (1)

Reference Role: Preparation (26), Synthetic Preparation (25)

34 Results | Sort: Relevance | View: Partial

1 127-09-3 CC(=O)O.[Na] 酢酸ナトリウム

2 23424-28-4 [13C]CC(=O)O.[Na] <sup>13</sup>Cの標識化合物

8 21107297-59-4 C1OC1C(=O)O.[Na] 酢酸ナトリウムの構造異性体

# 構造検索 - 検索画面

酢酸ナトリウムを化学構造式から検索する

- 構造作図画面で原子メニューツール をクリックすると周期表が表示される

All Substances Reactions References Suppliers For You NEW

Search by Substance Name, Functional Group, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI.

AND Molecular Formula Examples: C6H6 | (C8H8)x | C22H26CuN2O5.C2H3N

+ Add Advanced Search Field

Retrosynthetic Analysis: Make reaction plans with conditions, yields, catalysts, and experimental procedures.

Search CAS Lexicon: Build powerful searches using CAS concepts, chemical classes, and taxonomy.

Search CAS Sequences: Query BLAST, CDR, and Motif algorithms for nucleotide and protein based sequences.

化学構造で検索 Search Patent Markush

# 構造検索 – 回答一覧、絞り込み

構造検索した場合、フリーの有機成分と金属の比率の異なる物質も回答に含まれる

Substances search for drawn structure

References Reactions Suppliers

Structure Match: As Drawn (533), Substructure (277K), Similarity (11K)

Filtering: Number of Components: 2, Substance Class: Salt and Compound With

40 Results

Sort: Relevance View: Partial

1 127-09-3 CC(=O)O[Na] Components: 2  
酢酸ナトリウム(1:1)

2 126-96-5 CC(=O)[O-][Na+] Components: 2  
酢酸ナトリウム(2:1)

3 23424-28-4 [13C]CC(=O)O[Na] Components: 2  
13C の標識化合物

Number of Components: 2 (40), 3 (142), 4 (30), 5 or more (3)

Substance Class: Salt and Compound With (40), Coordination Compound (3)

2,549 References, 77 Reactions, 46 Suppliers

107 References, 31 Reactions, 39 Suppliers

23 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



# 成分 CAS RN® 検索 – 検索画面

酢酸(64-19-7) を成分に含む塩を検索する

## Advanced Search Field

- CAS Registry Number より Component RN を選択
- 成分 CAS RN® を入力

All Substances Reactions References Suppliers For You NEW

Search by Substance Name, Functional Group, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI.

Component RN 64-19-7 成分 CAS RN® で検索

Molecular Formula

CAS Registry Number Substance RN

Chemical Identifier Component RN

24 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



# 成分 CAS RN® 検索 - 回答一覧、絞り込み

成分 CAS RN®で検索した場合、酢酸を成分に含む多成分物質が得られる

Substances search for "64-19-7" Component RN

Filter Behavior: Filter by Exclude

Filtering: Number of Components: 2 X Element: Na X Substance Class: Salt and Compound With X

7 Results

1 61434-59-1 F—Na

2 61434-55-7 F—Na

3 127-09-3 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>·Na Components: 2 Component RN: 64-19-7 Sodium acetate

酢酸とフッ化ナトリウムの塩

酢酸ナトリウム

- Element フィルター  
含まれる元素を限定できる

Element

- C (31K)
- H (31K)
- O (31K)
- N (30K)
- S (6,394)
- Na (7)

View All

# 配位化合物の登録

# 配位化合物の登録

基本は単成分として収録し、結合は単結合で示す

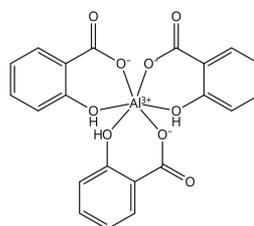
102-54-5



$C_{10}H_{10}Fe$

Ferrocene

15479-57-9



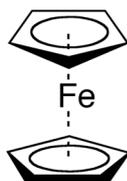
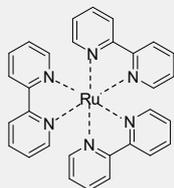
$C_{21}H_{15}AlO_9$

Aluminum salicylate

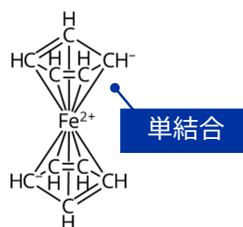
# 配位化合物の登録ルール

多くが単成分として登録、金属と非金属の結合は単結合の表記が原則

研究者のイメージ



実際の登録



# 配位化合物の検索

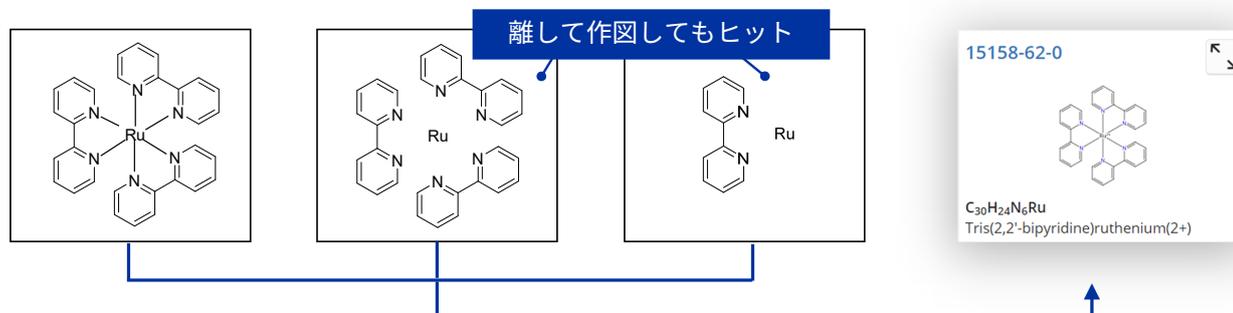
29 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



## 配位化合物の検索

登録ルール通りに作図しなくても、目的の配位化合物は検索できる

CAS SciFinder では作図した構造を幅広く解釈し、目的の配位化合物がヒットする



- 電荷は指定しなくてよい
- 離して作図すると、同じ配位子や金属を複数作図しても配位数は指定されない  
配位数を指定したいときは結合を作図する

30 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



# 配位化合物の検索

## 便利なフィルター

### Number of Components フィルター

成分数を限定できる

#### Number of Components

- 1 (10K)
- 2 (30K)
- 3 (3,776)
- 4 (907)
- 5 or more (506)

### Substance Class フィルター

物質の種類で限定できる

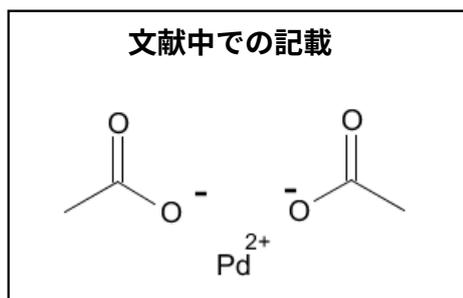
#### Substance Class

- Salt and Compound With (26K)
  - Organic/Inorganic Small Molecule (10K)
  - Coordination Compound (7,593)
  - Polymer (1,679)
  - Incompletely Defined Substance (171)
- [View All](#)

配位化合物は  
Coordination Compound  
で限定できる

# 塩で登録されている配位化合物

## 文献中での記載



3375-31-3



• 1/2 Pd(II)

$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2 \cdot 1/2\text{Pd}$

Components: 2

2成分で構成

- 各成分の分子式がピリオドで区切られている
- 先頭の成分の係数が1

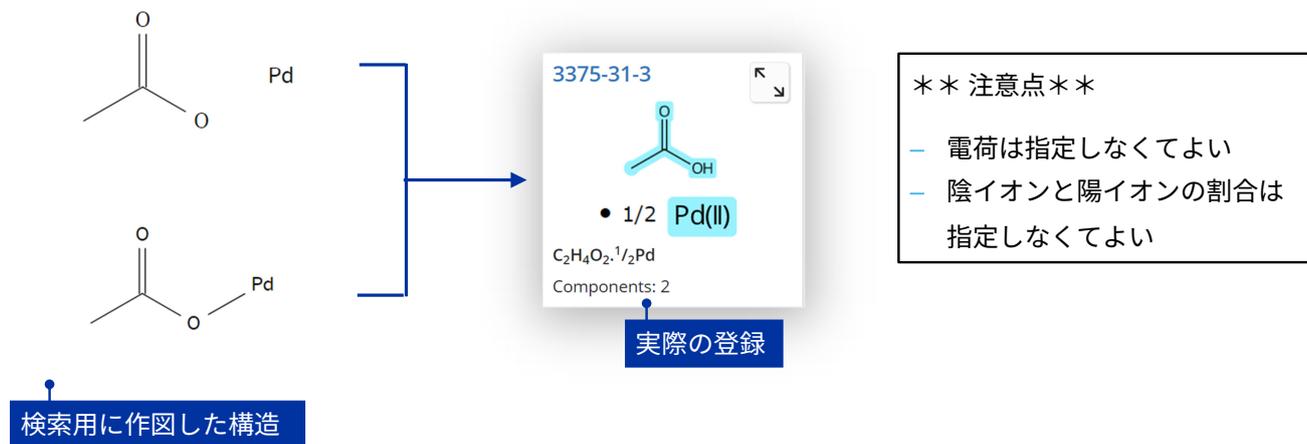
成分数：2

Substance Classes : Salt And Compound With

# 塩として登録されている配位化合物の検索

塩（多成分物質）の登録でも配位化合物（単成分）を想定した作図で検索可能

## 酢酸パラジウム錯体の例



# 検索例

## フェロセンを化学構造式から検索する

- 配位子と金属を結合で結ばなければ、同じ配位子や金属を複数作図しても配位数は変わらず検索結果も同じになる

# 構造検索 – 回答一覧、絞り込み

配位子と金属を離して作図すると、割合を指定しない検索となる

Substances search for drawn structure

References Reactions Suppliers

Structure Match: As Drawn (787), Substructure (176K), Similarity (153)

Number of Components: 1 (47) **成分数：1**

Substance Class: Coordination Compound (47)

Filtering: Number of Components: 1, Substance Class: Coordination Compound

Sort: Number of References: Descending

Results:

- 102-54-5: フェロセン, 配位子：金属 (2:1)
- 1610558-56-9: 配位子：金属 (3:2)
- 138489-78-8: 配位子：金属 (1:1)

**Number of References: Descending** で並べ替えると、文献で報告が多い物質から確認できる

**物質の種類：配位化合物**

35 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



# (参考) 配位子と金属の割合を指定した検索

配位子と金属を単結合で結ぶと割合を指定できる

化学構造式

配位子と金属を結ぶ結合は1か所が良い

配位子：金属 (2:1)

Substances search for drawn structure

Structure Match: As Drawn (768), Substructure (130K), Similarity (124)

Filtering: Number of Components: 1

Sort: Number of References: Descending

Results:

- 102-54-5: フェロセン, 配位子：金属 (2:1)
- 12125-80-3: Ferrocenium
- 51937-67-8: Ferrocene polymer

\*Substructure を選択した場合は部分構造検索のため、配位子が2個以上結合した回答も得られる

36 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.



# (参考) テンプレートツール

いくつかの配位子はテンプレートに登録されており、構造を簡単に作図できる

37 © 2025 American Chemical Society. All rights reserved.

CAS  
A Division of the  
American Chemical Society

JAICI ヘルプデスク

0120-003-462 (平日 9:00-17:00)

support@jaici.or.jp

# Thank you

Connect with us at [cas.org](https://cas.org)

 [linkedin.com/company/cas](https://linkedin.com/company/cas)

 [@CASchemistry](https://twitter.com/CASchemistry)

