

\* 目次 \*

塩・配位化合物の検索

塩・配位化合物の例 .....	2
塩の検索手順 .....	3
配位化合物の検索手順 .....	6

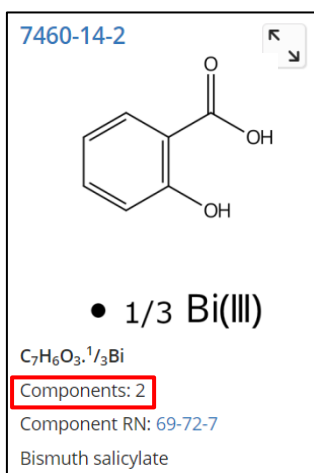
## 塩・配位化合物の例



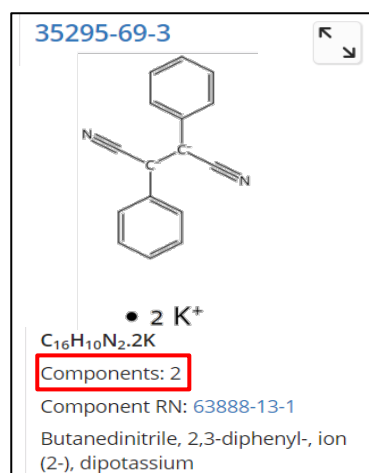
大部分の塩は、多成分物質として収録される

※遊離時に陰イオンとなる物質の割合を1とし、陽イオンとなる物質の割合を表記

### (1) 遊離の酸と金属の多成分物質

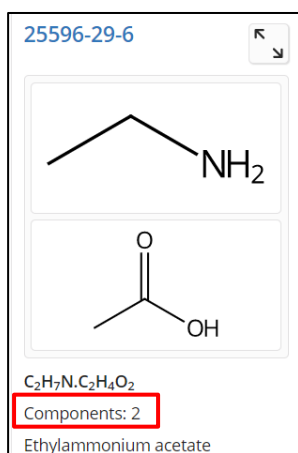


### (2) カルボアニオンと金属の多成分物質



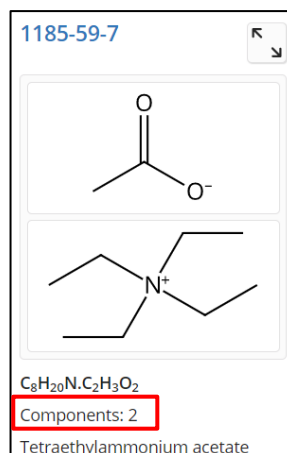
### (3) アミンの塩

アミンと遊離の酸からなる多成分物質として収録



### (4) オニウム塩（第四級アンモニウム塩など）

オニウムイオンとアニオンの多成分物質として収録

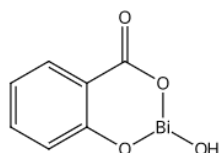




配位化合物と一部の塩は、一つの成分として収録される

(1) 環状構造をとる塩

14882-18-9

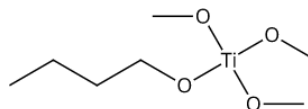


$C_7H_5BiO_4$   
Bismuth subsalicylate

(2) 有機成分を含む 2 種類以上の化合物と多価金属\*の塩

\* 金属元素の中で Al, Ba, Be, Ca, Cd, Cs, Fr, Ga, K, Li, Mg, Na, Ra, Rb, Sn, Zn を除く金属

126506-61-4



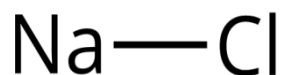
$C_7H_{18}O_4Ti$   
Titanium, butoxytris(methanolato)-, (T-4)-

(3) その他の塩

(1)~(2) の定義に合致しない酸の金属塩は、通常の化合物として収録される

(例: 塩酸のナトリウム塩 (Cl Na))

7647-14-5

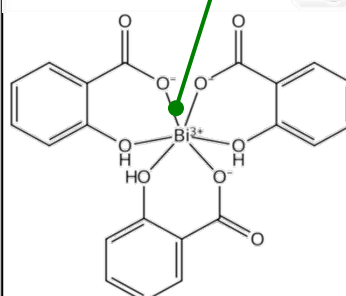


ClNa  
Sodium chloride

【配位化合物】

配位結合は単結合と同じ表記

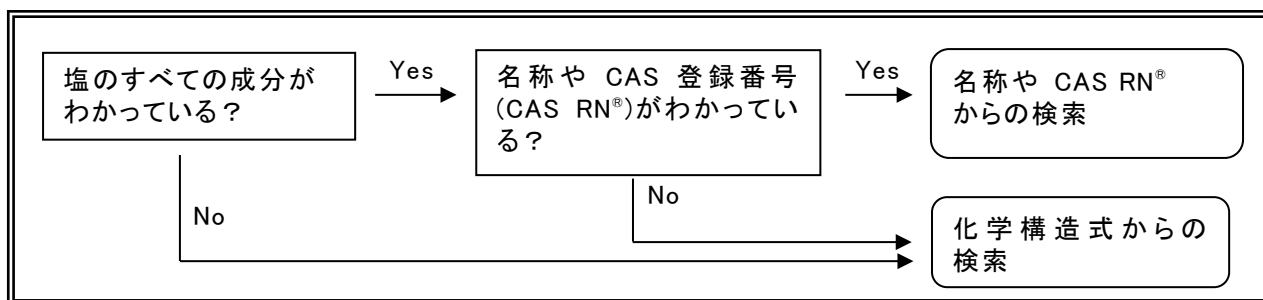
19034-57-2



$C_{27}H_{27}BiO_9$   
Tri[2-(hydroxy-4-(benzoate-4O)]bismuth

## 塩の検索手順

■ 塩の検索は、以下のチャートにしたがって行う



■ Substances から検索 - 名称や CAS RN®

The screenshot shows the SciFinder search interface. On the left, the 'Substances' tab is selected. The search bar contains 'Sodium chloride'. A red box highlights the search bar with the text '名称または CAS RN® を入力する' (Enter name or CAS RN®). A blue arrow points from the search bar to a search result card for 'Na—Cl' (Sodium chloride). The card shows the chemical formula, name, and statistics: 423K References, 111K Reactions, and 277 Suppliers.

■ 構造検索

思いつく構造で検索すれば、CAS SciFinder<sup>n</sup> が幅広く解釈し、該当の塩をヒットさせ

※遊離時の陰イオンと陽イオンの割合も指定しなくてよい。  
※電荷は指定しなくてよい。

【安易な検索方法】

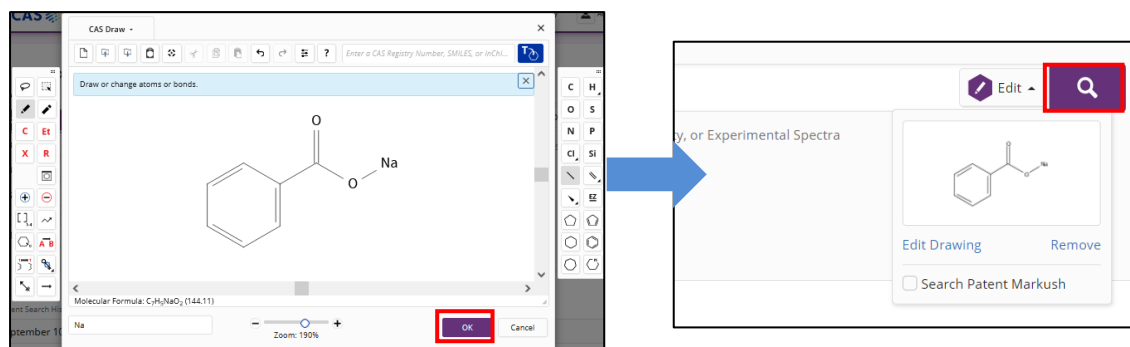
Four chemical structures of sodium benzoate are shown, representing different ways to draw the salt (e.g., [O-]C(=O)c1ccccc1.[Na+], [O-]C(=O)c1ccccc1.[Na], [O-]C(=O)c1ccccc1.[Na+], and [O-]C(=O)c1ccccc1.[Na]).

These structures are input into CAS SciFinder<sup>n</sup>.

【検索結果】

The search result card for 'Sodium benzoate' is shown, with the chemical formula C7H5O2.Na, Components: 2, Component RN: 65-85-0, and the name 'Sodium benzoate'.

思いつく構造を作図し検索する(安息香酸ナトリウムの例)。



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

成分数による限定

物質の種類による限定  
※注意点あり

Structure Match

As Drawn (220)

Substructure (39K)

Similarity (2,781)

Analyze Structure Precision

Chemscape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

Create Chemscape Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

Commercial Availability

Available (14)

Not Available (206)

Reaction Role

Product (31)

Reactant (5)

Reagent (1)

Substances (220)

Sort: Number of References: Descending View: Partial

Relevance

CAS RN: Ascending

CAS RN: Descending

Molecular Formula: Ascending

Molecular Formula: Descending

Molecular Weight: Ascending

Molecular Weight: Descending

Number of References: Ascending

Number of References: Descending

Number of Suppliers

532-32-1

C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>O<sub>2</sub>Na

Components: 2

Component RN: 65-85-0

Sodium benzoate

29K References

3,773 Reactions

106 Suppliers

8000-95-1

C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>·C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>O<sub>2</sub>Na

Components: 3

Caffeine sodium benzoate

383 References

0 Reactions

10 Suppliers

121183-10-6

C<sub>20</sub>H<sub>38</sub>O<sub>7</sub>S·C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>O<sub>2</sub>Na

Components: 3

1,4-bis(2-ethylhexyl) 2-sulfobutanoate sodium salt (1:1) mixt. with sodium be...

18 References

0 Reactions

2 Suppliers

155070-30-7

C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>O<sub>2</sub>·CH<sub>2</sub>O<sub>3</sub>·2Na

Components: 3

Benzoic acid, sodium salt (1:1), mixt. with sodium carbonate (1:1)

14 References

0 Reactions

0 Suppliers

956617-30-4

C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>O<sub>2</sub>·C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>6</sub>Na

Components: 3

Geogard Ultra

12 References

0 Reactions

0 Suppliers



塩は複数の物質の種類(Substance Class)に分かれて登録される。

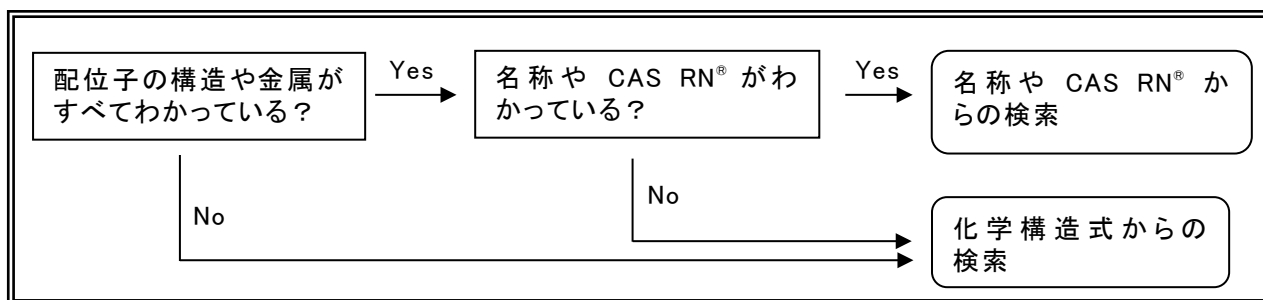
例:

- ・多成分物質として収録される塩→「Salt and Compound With」
- ・一つの成分として収録される塩→「Organic/Inorganic Small Molecule」
- ・塩が含まれる混合物→「Mixture」

このため、物質の種類(Substance Class)で限定する場合、必要に応じて「Salt and Compound With」以外の種類も確認する。

## 配位化合物の検索手順

- 配位化合物の検索は、以下のチャートにしたがって行う



- Substances から検索 - 名称や CAS RN®

名称または CAS RN® を入力する

102-54-5

C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>Fe  
Ferrocene

21K References 5,654 Reactions 83 Suppliers


- 構造検索





配位子と金属の間の配位結合は、書かなくても CAS SciFinder<sup>®</sup> が幅広く解釈し該当の配位化合物をヒットさせる。  
 ※配位結合を描く場合、**単結合**を用いる。配位結合で配位子と金属結んだ場合、結合により結ばれた配位子と金属の割合を基に検索する。  
 ※電荷は指定しなくてよい。

－ 配位子と金属の割合を指定しない検索

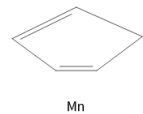
配位子と金属は離して構造を作図する。

いくつかの配位子は、 テンプレートツールから利用できる

配位子と金属を結合で結ばなければ、同じ配位子や同じ金属を複数作図しても配位数は変わらず検索結果は同じ。

CAS Draw

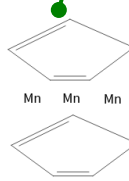


Mn

Molecular Formula: C<sub>5</sub>H<sub>6</sub> (66.10) · Mn (54.94)

OK Cancel

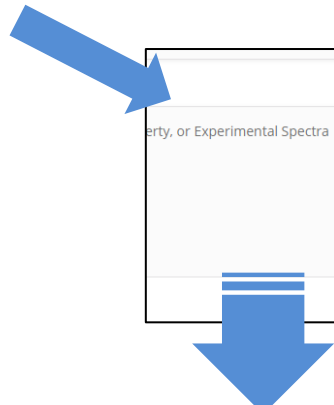
CAS Draw



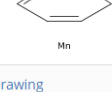
Mn Mn Mn

Molecular Formula: C<sub>5</sub>H<sub>6</sub> (66.10) · Mn (54.94) · C<sub>5</sub>H<sub>6</sub> (66.10) · Mn (54.94) · C<sub>5</sub>H<sub>6</sub> (66.10) · Mn (54.94)

OK Cancel




Property, or Experimental Spectra



Mn

Edit Drawing Remove

☐ Search Patent Markush



成分数による限定

物質の種類による限定  
※配位結合を有する化合物に限定する場合、「Coordination Compound」で限定

Substances (35)

Structure Match

As Drawn (35)

Substructure (12K)

Similarity (171)

Analyze Structure Precision

Chemscape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

Learn more about Chemscape.

Create Chemscape Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

Commercial Availability

Reaction Role

Reference Role

Number of Components

Substance Class

Relevance

CAS RN: Ascending

CAS RN: Descending

Molecular Formula: Ascending

Molecular Formula: Descending

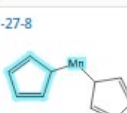
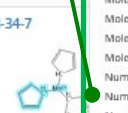
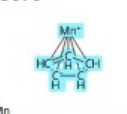
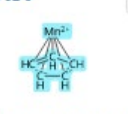
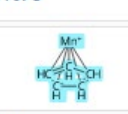
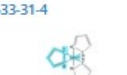
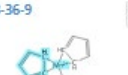
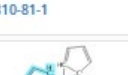
Molecular Weight: Ascending

Molecular Weight: Descending

Number of References: Ascending

Number of References: Descending

Number of Suppliers

<p>1271-27-8</p>  <p>C<sub>12</sub>H<sub>10</sub>Mn</p> <p>Di-2,4-cyclopentadien-1-ylmanganese</p> <p>84 References</p>	<p>462633-34-7</p>  <p>C<sub>12</sub>H<sub>10</sub>Mn</p> <p>Manganate(1-), tri-2,4-cyclopentadien-1-yl-</p> <p>1 Reference</p>	<p>92278-91-6</p>  <p>C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>Mn</p> <p>(η<sup>5</sup>-2,4-Cyclopentadien-1-yl)manganese</p> <p>17 References</p>	<p>150566-92-0</p>  <p>C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>Mn</p> <p>(η<sup>5</sup>-2,4-Cyclopentadien-1-yl)manganese (1-)</p> <p>5 References</p>	<p>94594-97-5</p>  <p>(C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>Mn)<sub>n</sub></p> <p>Manganese, (η<sup>5</sup>-2,4-cyclopentadien-1-yl)-, homopolymer</p> <p>1 Reference</p>
<p>462633-31-4</p> 	<p>462633-36-9</p> 	<p>385810-81-1</p> 		

7

－ 配位子と金属の割合を指定した検索

配位子と金属の間に結合を作図する。

配位子と金属の間に複数の配位結合が存在する場合、各配位子と金属間で最低一か所を結ばばよい。

**配位子: 金属 = 2:1**

OK

**配位子: 金属 = 4:1**

OK

**配位子:金属 = 2:1  
の配位化合物が  
得られる**

**配位子:金属 = 4:1  
の配位化合物が  
得られる**

**JAICI**  
化学情報協会

情報事業部

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

TEL: 0120-003-462 FAX: 03-5978-4090

URL: [www.jaici.or.jp](http://www.jaici.or.jp)

E-mail: [support@jaici.or.jp](mailto:support@jaici.or.jp)

202109