

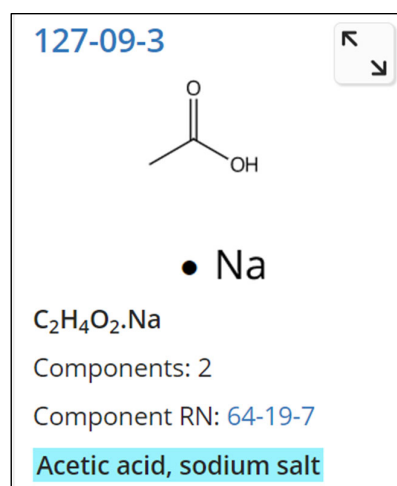


CAS SciFinderⁿ オンライン講習会 (塩・配位化合物)



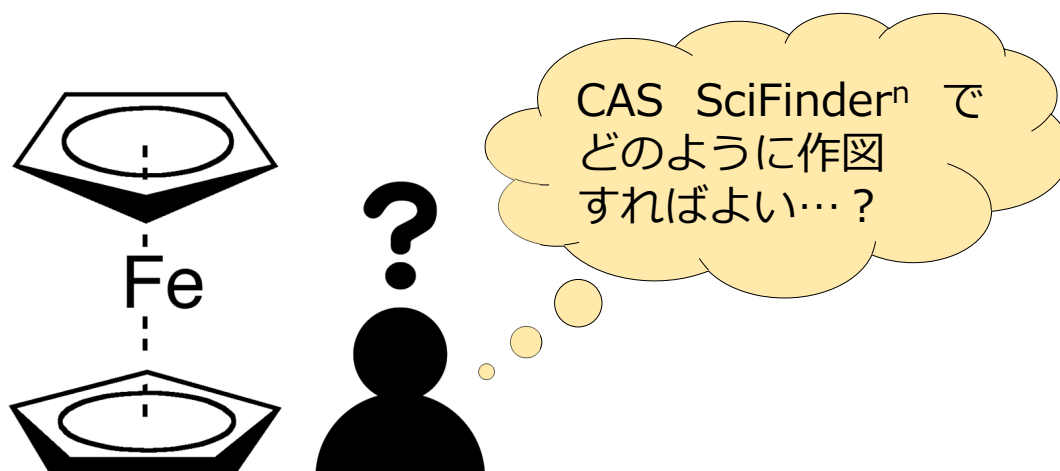
塩や配位化合物の検索でお困りでないでしょうか？

想像と違う構造が表示
される…
本当に合ってる??



CAS SciFinderⁿ

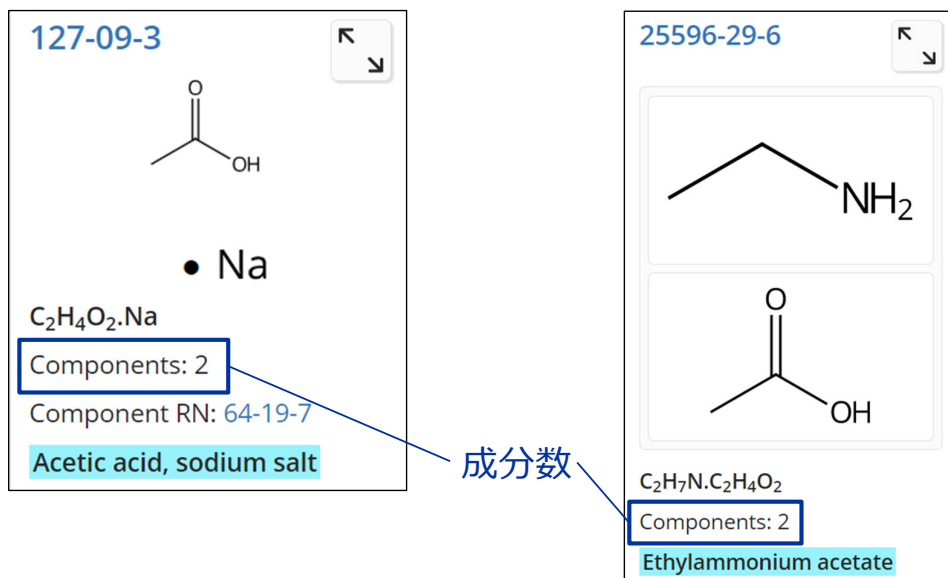
塩や配位化合物の検索でお困りでないでしょうか？



本日の内容

- 塩の登録，検索
- 検索例（デモ）
- 配位化合物の登録，検索
- 検索例（デモ）
- 反応検索への活用

塩の登録



～大部分の塩は、**多成分物質**として収録～

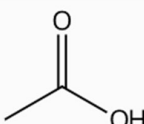
～多成分物質とは？～

多成分物質 = 複数の成分から構成される物質

CAS Registry Number
62-54-4

酢酸カルシウム

成分1



成分2 • $1/2 Ca$

$C_2H_4O_2 \cdot 1/2 Ca$

Components: 2

Component RN: 64-19-7

Acetic acid, calcium salt (2:1) (ACI)

<有機物質の分子式のルール>

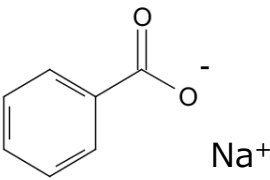
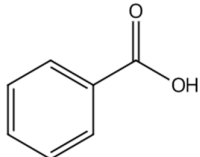
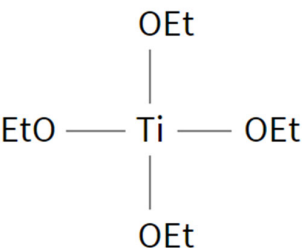
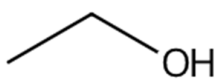
- ① 有機成分を優先
- ② 炭素数の多い成分優先
- ③ 炭素数が同じ場合は、水素数の多い成分優先
- ④ 炭素、水素数が同じ場合は、他の元素のアルファベット順

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**

2 成分
で構成

塩の登録ルール(1) 金属塩*

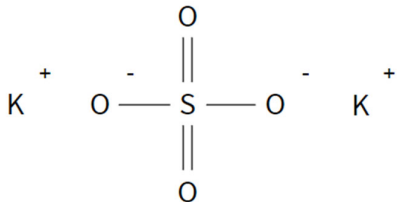
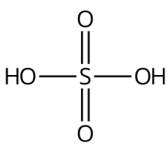
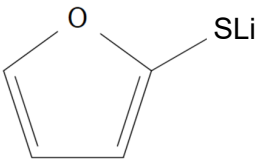
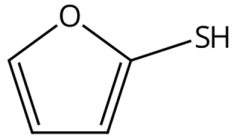
「フリーの有機成分+金属」の**多成分物質**で登録が原則

研究者のイメージ	実際の登録
	 • Na
	 • 1/4 Ti(IV)

* 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

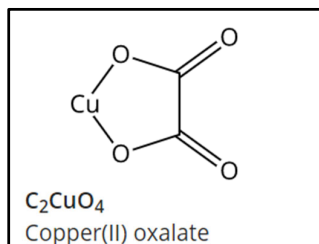
研究者のイメージ	実際の登録
	 • 2 K
	 • Li

* 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

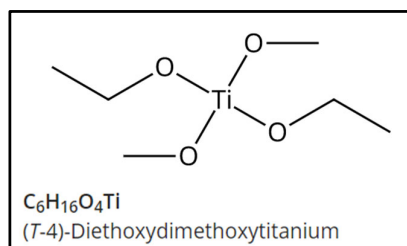
塩の登録ルール(1) 金属塩の例外

単成分で登録

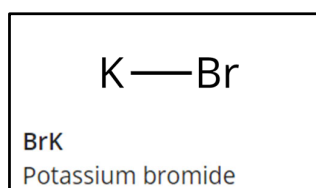
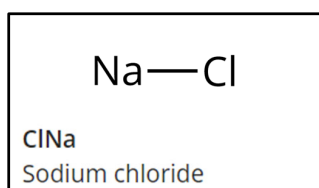
■ 例外 1 : 環状構造



■ 例外 2 : 有機成分が 2 種類以上



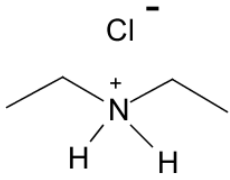
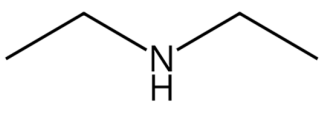
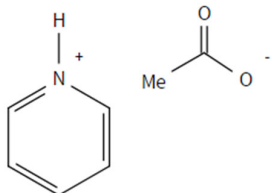
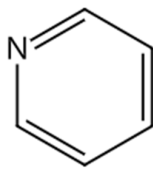
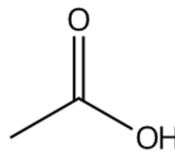
■ 例外 3 : 定義外*



塩の登録ルール(2) 金属塩以外

多成分物質で登録が原則

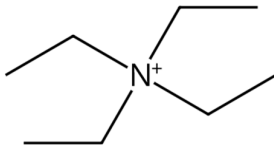
第 1 ～ 3 級アミン塩・ピリジニウム塩 : 由来する酸成分 + 塩基成分

研究者のイメージ	実際の登録
	 • HCl
	 

塩の登録ルール(2) 金属塩以外

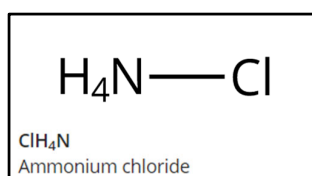
多成分物質で登録が原則

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
$\text{Et}_4\text{N}^+ \text{Cl}^-$	 • Cl^-

単成分で登録

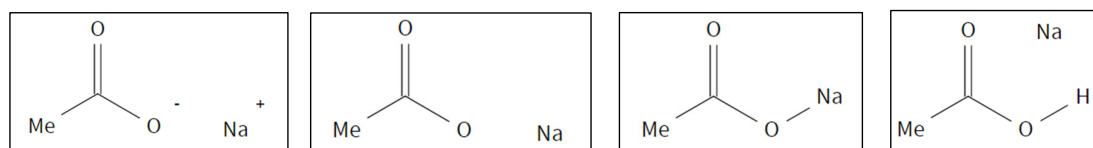
■ 例外：塩化アンモニウム



塩の検索

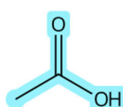
このような登録ルールはありますが...

CAS SciFinderⁿ 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！！



↓ どの構造を作図してもヒット

127-09-3



• Na

- * 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

便利なフィルター

• Number of Components フィルター

→成分数で限定できる

^ 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](#)

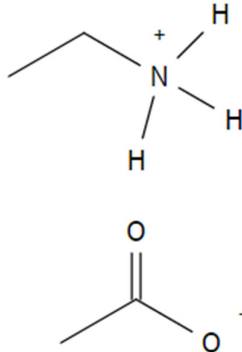
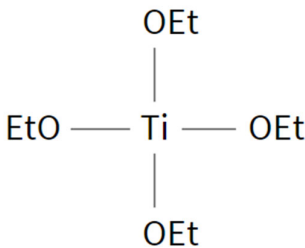
** 注意点 **

- 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 には塩以外も含まれる.

本日の内容

- 塩の登録, 検索
- 塩の検索例 (デモ)
- 配位化合物の登録, 検索
- 配位化合物の検索例 (デモ)
- 反応検索への活用

デモ例

(1) アミン塩	(2) 金属塩
	

→ 思いついたイメージを作図して検索してみる

本日の内容

- 塩の登録, 検索
- 塩の検索例 (デモ)
- 配位化合物の登録, 検索
- 配位化合物の検索例 (デモ)
- 反応検索への活用

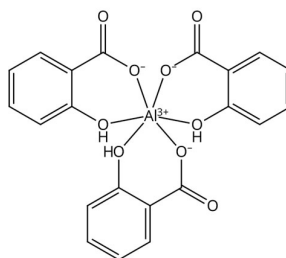
配位化合物の登録

102-54-5



$C_{10}H_{10}Fe$
Ferrocene

15479-57-9



$C_{21}H_{15}AlO_9$
Aluminum salicylate

～基本, **単成分**として収録～
結合は**単結合**

配位化合物の登録ルール

多くが**単成分**として登録

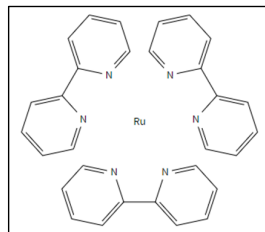
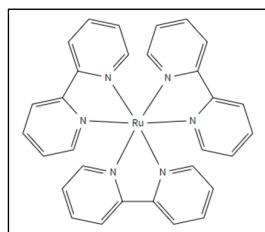
金属と非金属の結合は**単結合**で表記が原則

研究者のイメージ	実際の登録

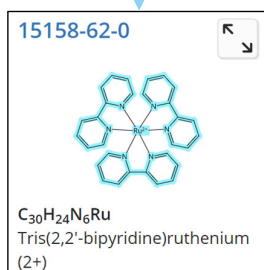
配位化合物の検索

このような登録ルールはありますが...

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！！



離して作図してもヒット



- * 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。

配位化合物の検索

便利なフィルター

• Number of Components フィルター

→成分数で限定できる

^ 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

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

** 注意点 **

物質によっては Salt and Compound With や organic/Inorganic Small Molecule として登録されることもある。

^ Substance Class

☐ Salt and Compound With (26K)

☐ Organic/Inorganic Small Molecule (10K)

☒ **Coordination Compound** (7,593)

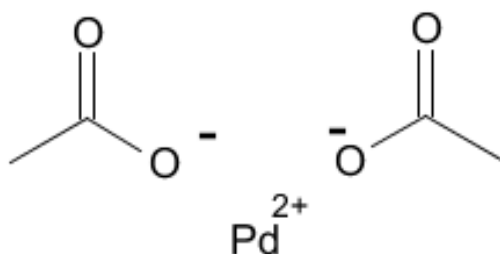
☐ Polymer (1,679)

☐ Incompletely Defined Substance (171)

[View All](#)

塩？ 配位化合物？

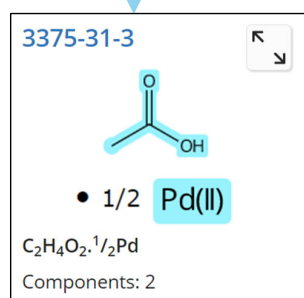
文献中の記載



酢酸パラジウム錯体の例

塩？ 配位化合物？

多成分物質（塩）として登録されるが，単成分（配位化合物）を想定して作図してもヒット！



重要な部分を作図して検索！

* フィルターの利用には注意が必要

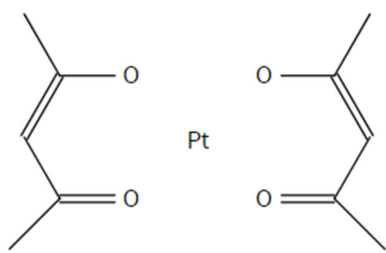
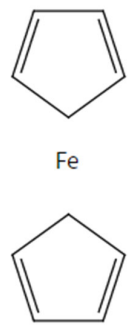
成分数：2

Substance Classes : Salt And Compound With

本日の内容

- 塩の登録，検索
- 塩の検索例（デモ）
- 配位化合物の登録，検索
- 配位化合物の検索例（デモ）
- 反応検索への活用

デモ例

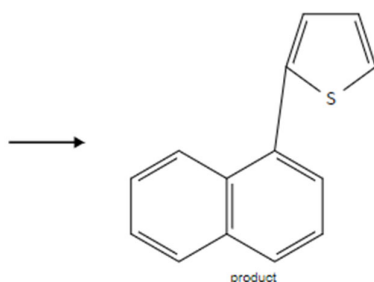
(1) 白金アセチルアセトナート	(2) メタロセン化合物
	

本日の内容

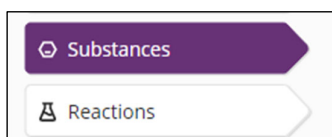
- 塩の登録, 検索
- 塩の検索例 (デモ)
- 配位化合物の登録, 検索
- 配位化合物の検索例 (デモ)
- 反応検索への活用

反応検索

Pd を含む触媒を使った下記の反応を検索



Substances からまず触媒を検索



まとめ

- 塩，配位化合物の登録ルールはあるが，
基本は**イメージ通り作図**して検索しても
目的の物質がヒットする！
- フィルターで絞り込む際は，登録ルールに
気を付ける
- 文献数での並べ替えも活用する