

* 目次 *

塩・配位化合物の検索

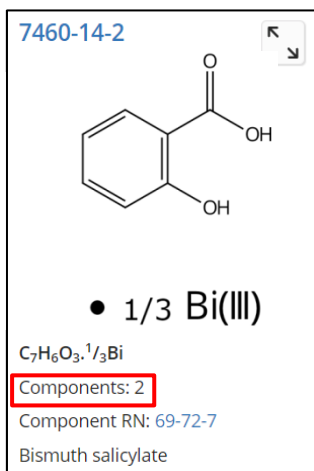
塩・配位化合物の例.....	2
塩の検索手順.....	3
配位化合物の検索手順.....	6

塩・配位化合物の例

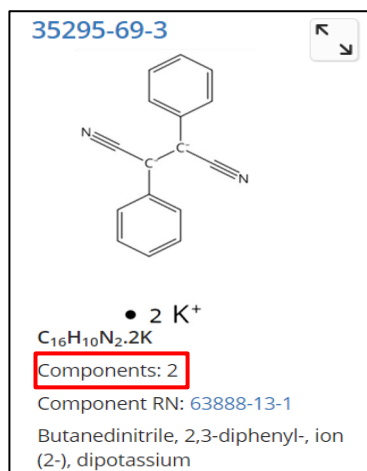


大部分の塩は、多成分物質として収録される
 ※遊離時に陰イオンとなる物質の割合を1とし、陽イオンとなる物質の割合を表記

(1) 遊離の酸と金属の多成分物質

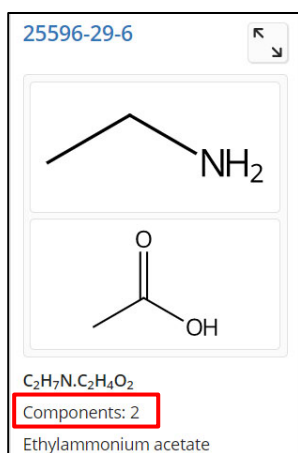


(2) カルボアニオンと金属の多成分物質



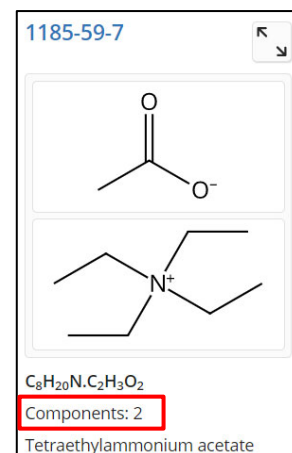
(3) アミンの塩

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）

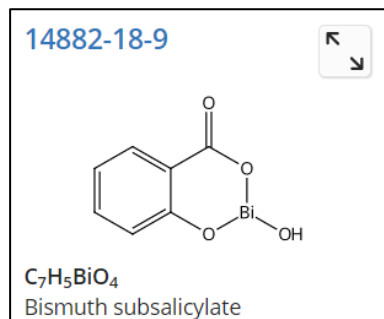
オニウムイオンとアニオンの多成分物質として収録





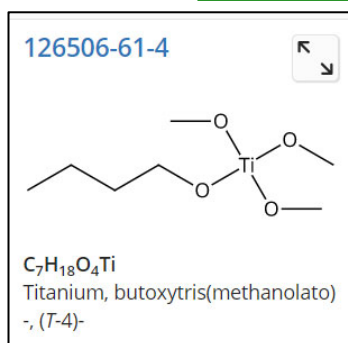
配位化合物と一部の塩は、一つの成分として収録される

(1) 環状構造をとる塩



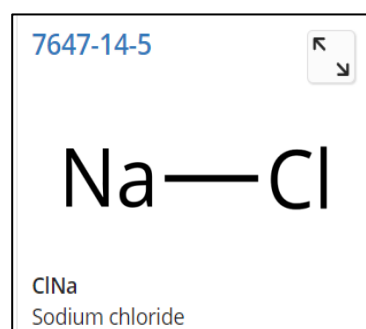
(2) 有機成分を含む 2 種類以上の化合物と多価金属*の塩

* 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



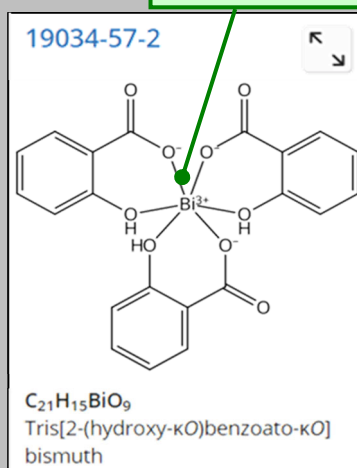
(3) その他の塩

(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))



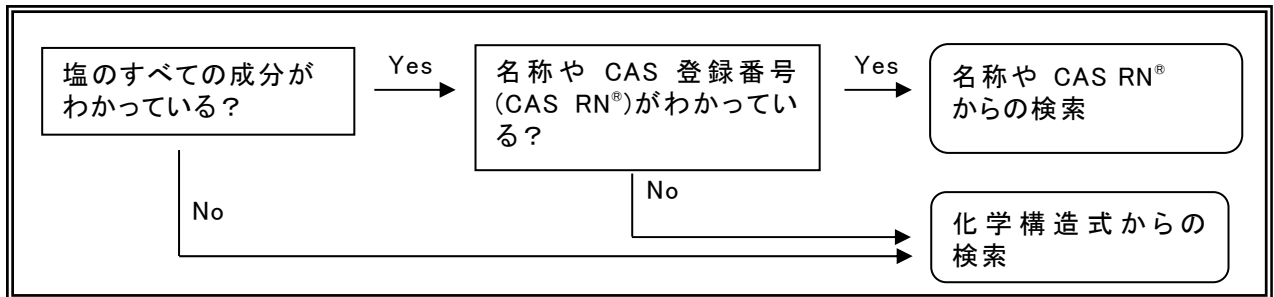
【配位化合物】

配位結合は単結合と同じ表記



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®

Searching for...
 Substances (selected)
 Reactions
 References
 Suppliers

Substances
 Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.

Sodium chloride

名称または CAS RN®
を入力する

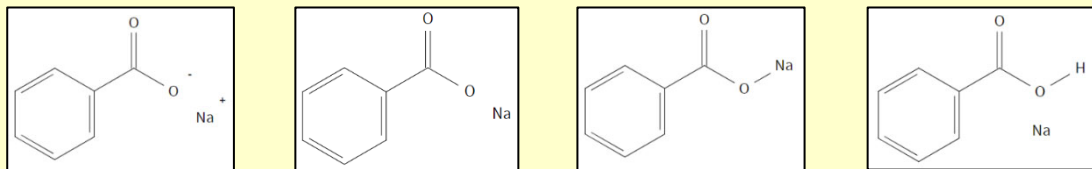
7647-14-5
 Na—Cl
 ClNa
 Sodium chloride
 423K References, 111K Reactions, 277 Suppliers

■ 構造検索



思いつく構造で検索すれば、CAS SciFinderⁿ が幅広く解釈し、該当の塩をヒットさせる。
 ※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。

【安息香酸ナトリウムを検索する際の質問式】



CAS SciFinderⁿ

【検索結果】

532-32-1

c1ccccc1C(=O)O

• Na

C₇H₆O₂Na
 Components: 2
 Component RN: 65-85-0
 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)。

The image shows the CAS Draw software interface on the left, where the chemical structure of sodium benzoate is being drawn. On the right, a search results window is shown, displaying the same structure and options like 'Edit Drawing' and 'Remove'.

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

The screenshot shows the 'Substances' search results page. On the left, there are filters for 'Structure Match' (As Drawn, Substructure, Similarity), 'Analyze Structure Precision', 'Chemscape Analysis', 'Filter Behavior', 'Commercial Availability', and 'Reaction Role'. The main area displays a grid of search results for sodium benzoate and related compounds, including their CAS numbers, chemical structures, and component information. A dropdown menu is open, showing sorting options like 'Number of References: Descending'.

成分数による限定

- Number of Components
- 1 (1)
- 2 (18)
- 3 (88)
- 4 (52)
- 5 or more (61)

物質の種類による限定
※注意点あり

- Substance Class
- Mixture (101)
- Salt and Compound With (63)
- Polymer (49)
- General Derivative (27)
- Coordination Compound (10)

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

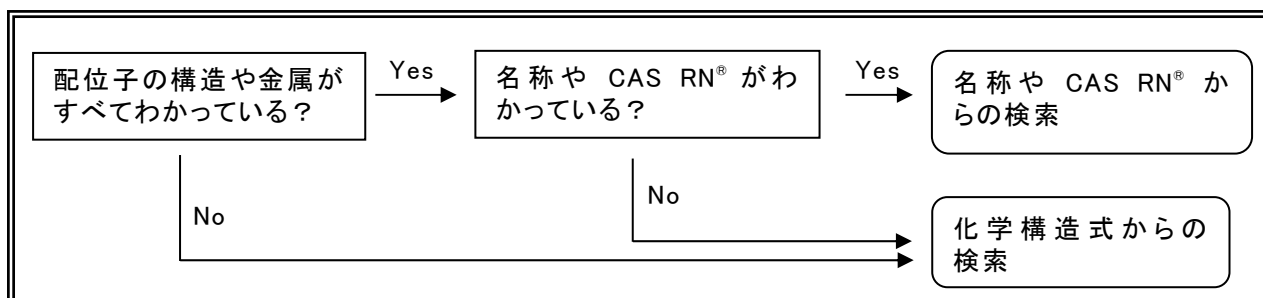
例:

- ・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」 など

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®

The screenshot shows the SciFinder search interface. The 'Substances' tab is selected in the left sidebar. The search bar contains 'Ferrocene'. A yellow callout box with a red border points to the search bar, containing the text '名称または CAS RN® を入力する'. A red dot is placed at the end of the search text. A search button with a magnifying glass icon is highlighted with a red box. A large blue arrow points from the search button to a search result card for Ferrocene. The result card shows the chemical structure of ferrocene, its molecular formula $C_{10}H_{10}Fe$, and statistics: 21K references, 5,654 reactions, and 83 suppliers.

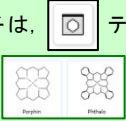
- 構造検索



配位子と金属の間の配位結合は、書かなくても CAS SciFinder[®] 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。

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
※配位結合を有する化合物に限定する場合、「Coordination Compound」で限定

- 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

配位子: 金属 = 4:1

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