

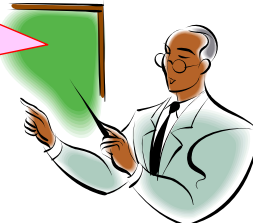
# 分野別構造作図のポイント (塩, 配位化合物)



原報と同じ構造を描いて  
検索したのに, 回答が  
得られませんでした

REGISTRY ファイルには,  
登録形式のルールがあります.

ルールに則った構造を作図し,  
検索してください



このセミナーでは, REGISTRY ファイルの塩・配位化合物の  
登録形式と構造作図のポイントを説明します

---

## 本日の内容

- 塩
  - 登録形式
  - 塩の検索のポイント
- 配位化合物
  - 登録形式
  - 作図のポイント

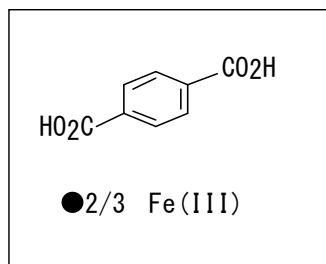
---

## 本日の内容

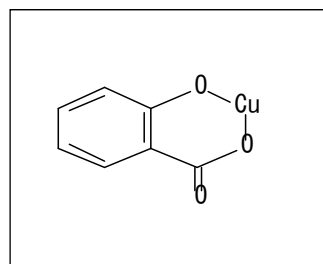
- 塩
  - 登録形式
  - 塩の検索のポイント
- 配位化合物
  - 登録形式
  - 作図のポイント

# 塩の登録形式

- 多成分物質として登録される塩と、単成分物質として登録される塩がある。



多成分



単成分

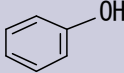
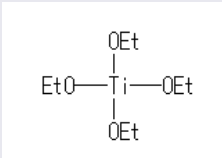
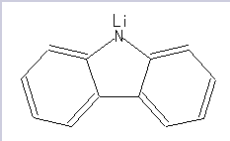
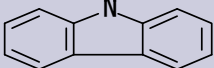
## ① 多成分物質として登録される塩

- I. ヘテロ原子 (O, S, Se, Te, N, P, As) に結合している水素が無置換の金属で置換されて生成した塩は、置換前の成分と金属の多成分物質として登録される。

– カルボン酸，硝酸，アルコール類などの金属塩

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\text{CH}_3\text{COONa}$	IN Acetic acid, sodium salt (1:1) MF C2 H4 O2 . Na <p>●Na</p>

遊離の酸であるカルボン酸の分子式 (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>)  
\* 水素の数に注意

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
PhONa	IN Phenol, sodium salt (1:1) MF C6 H6 O . Na  ● Na
	IN Ethanol, titanium(4+) salt (4:1) MF C2 H6 O . 1/4 Ti H3C—CH2—OH ● 1/4 Ti (IV) <div style="border: 1px solid red; padding: 2px; display: inline-block;">各成分の存在比は、先頭に表記される成分を 1 とみなす</div>
	IN 9H-Carbazole, lithium salt (1:1) MF C12 H9 N . Li  ● Li



酸と金属は別成分に分かれている

## II. アミン類の塩や第四級アンモニウム塩は通常、多成分物質として登録される。

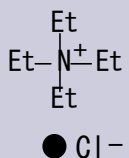
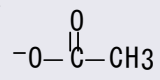
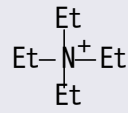
### — 第一, 二, 三級アミンの塩

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\text{EtNH}_3^+ \text{CH}_3\text{COO}^-$	IN Ethanamine, acetate (1:1) MF C2 H7 N . C2 H4 O2 CM 1 $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ CM 2 $\text{HO}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_3$
$\text{Et}_3\text{NH}^+ \text{Cl}^-$	IN Ethanamine, N,N-diethyl-, hydrochloride (1:1) MF C6 H15 N . Cl H $\begin{array}{c} \text{Et} \\   \\ \text{Et}-\text{N}-\text{Et} \end{array}$ ● HCl

中性の塩基と中性の酸からなる

\* 塩化アンモニウム (NH<sub>4</sub>Cl) は単一成分として登録される。

## – 第四級アンモニウム塩

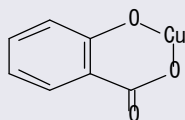
文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
$\text{Et}_4\text{N}^+ \text{Cl}^-$	IN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, chloride (1:1) MF C8 H20 N . Cl 
$\text{Et}_4\text{N}^+ \text{CH}_3\text{COO}^-$	IN Ethanaminium, N,N,N-triethyl-, acetate (1:1) MF C8 H20 N . C2 H3 O2 CM 1  CM 2 

電荷を帯びた塩基成分と酸成分からなる

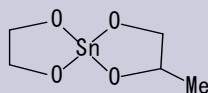
## ② 単成分物質として登録される塩

### I. 環状構造をとる塩 (水素が多価金属に置換されて環を形成)

IN Copper, [2-(hydroxy-kO)benzoato(2-)-kO]-  
MF C7 H4 Cu O3

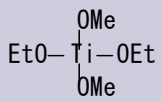
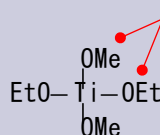
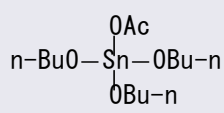
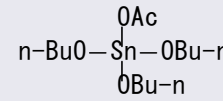


IN 1,4,6,9-Tetraoxa-5-stannaspiro[4.4]nonane, 2-methyl-  
MF C5 H10 O4 Sn

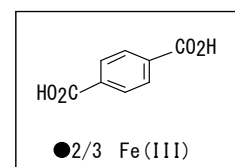


\* ヘテロ原子に金属が直接結合し、環状構造になるのは 5 員環または 6 員環の場合である。ただし、金属が Ge, Sn, Pb, Sb, Bi の場合は環のサイズの制限はない。

## II. 2種類以上の有機成分を含む化合物と多価金属との塩

文献に記載された構造	REGISTRY ファイルの登録
	IN Titanium, diethoxydimethoxy-, (T-4)- (9CI) MF C6 H16 O4 Ti  <div style="border: 1px solid red; padding: 5px; margin-top: 10px;"> <p>2種類の有機成分 (OMe と OEt) を含むため、単成分登録になる。</p> <p>* 1種類 (例えば OEt のみ) だと、多成分登録になる (スライド 6 参照)</p> </div>
	IN Stannane, (acetyloxy)tributoxy- (9CI) MF C14 H30 O5 Sn 

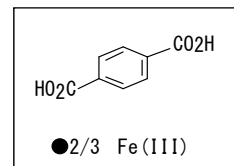
## 多成分物質として登録されている塩の検索



### 検索のポイント

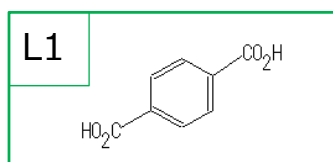
- 分子式 (MF) は各成分の分子式をピリオドで区切る。  
=> S C8H6O4.2/3FE/MF
- 成分 CAS 登録番号 (/CRN), 成分分子式 (/BI) による検索が有効  
=> S 100-21-0/CRN AND FE
- 構造検索をする場合は、各成分を別々にアップロードする。(次のスライド参照)

## 多成分物質として登録されている塩の検索 (続き)



### <構造検索>

- 各成分を別々に作図したものをアップロードして, AND 検索を実行する.



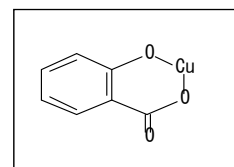
- 二つの構造が同一成分中に存在する物質と, 別々に成分に存在する物質の両方がヒットする.

参考: 金属を含む物質に限定する他の方法

- L1 の構造検索後に, 辞書検索を利用する.  
=> S L1 のフルファイル検索の結果 AND M/ELS
- L1 の構造検索時に, 金属のスクリーンを利用する.  
=> S L1 の構造質問式 AND 金属のスクリーンの L 番号\*

\* =>SCR 1918 より L 番号を作成

## 単成分物質として登録されている塩の検索



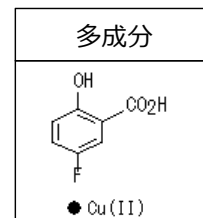
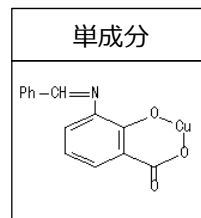
### 検索のポイント

- 単成分物質 (1 成分) の分子式 (MF) で検索する.

=> S C7H4CUO3/MF

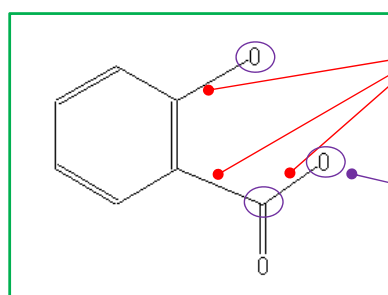
- 構造検索をする場合は, 一つの画面上に構造を作図してアップロードする.

# 単成分物質および多成分物質 で登録される可能性がある塩 の検索



## 検索のポイント

- 単成分および多成分の両方の塩がヒットするように作図する。

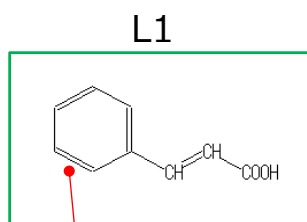


これらの結合の結合属性を環/鎖に指定する

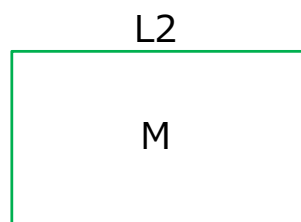
結合属性を変更すると、その結合の両端のノード属性も自動的に変更される

## 検索例 1

- 桂皮酸およびその誘導体の金属塩を検索する



別々に作図し、**AND** 演算する



環は、置換基を許容し、環の孤立化を指定する



---

## 本日の内容

- 塩
  - 登録形式
  - 塩の検索のポイント
- 配位化合物
  - 登録形式
  - 作図のポイント

---

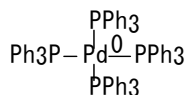
## 配位化合物の登録

- 配位化合物は中心金属と配位子が結合した単成分の構造で登録される。
  - 配位化合物を含む多成分物質も存在する。

# 配位化合物のレコード例

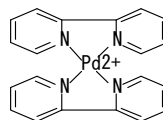
## 単座配位子の錯体

RN 14221-01-3  
MF C72 H60 P4 Pd  
CI CCS



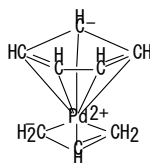
## 多座配位子の錯体

RN 47386-79-8  
MF C20 H16 N4 Pd  
CI CCS, COM



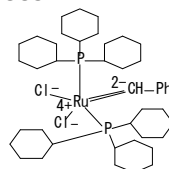
## $\pi$ -アリル錯体

RN 1271-03-0  
MF C8 H10 Pd  
CI CCS, COM



## カルベン錯体

RN 172222-30-9  
MF C43 H72 Cl<sub>2</sub> P<sub>2</sub> Ru  
CI CCS

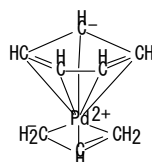


# 配位化合物の検索

## 辞書検索のポイント

- 分子式は、配位子と中心金属を含めて組み立てる。

=> S C8H10PD/MF



- クラス識別子で配位化合物に限定できる。(CCS/CI)

=> S L# AND CCS/CI

\* /CI は物質全体を対象とした検索フィールドである。そのため、各成分のクラス識別子は検索対象ではない。

# 配位化合物の検索

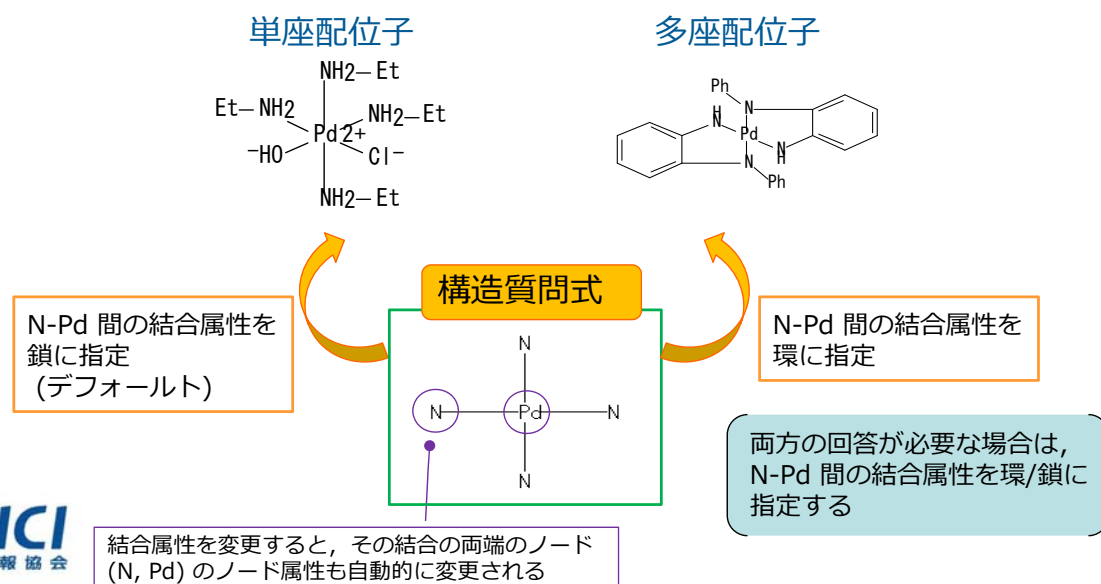
## 構造検索のポイント

(各内容の詳細は、スライド 21~25 で紹介)

- 金属と配位子は同一画面に作図する.
- 金属と配位子間の結合属性およびノード属性に注意する.
- 金属と配位子の結合形態が不明な場合は不定結合を使用する. または結合を作図しない.
- 配位子の環の孤立化に注意する.
- 配位化合物のスクリーン (2049) を利用して配位化合物に限定ができる.

# 配位化合物の結合属性・ノード属性

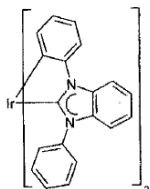
- 結合属性・ノード属性の指定によって、得られる回答が異なる.



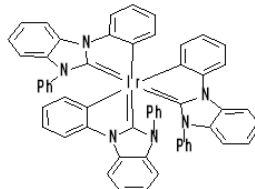
# 共役系配位子の作図

- REGISTRY ファイルでは、共役系は電子が局在化した構造で登録される。

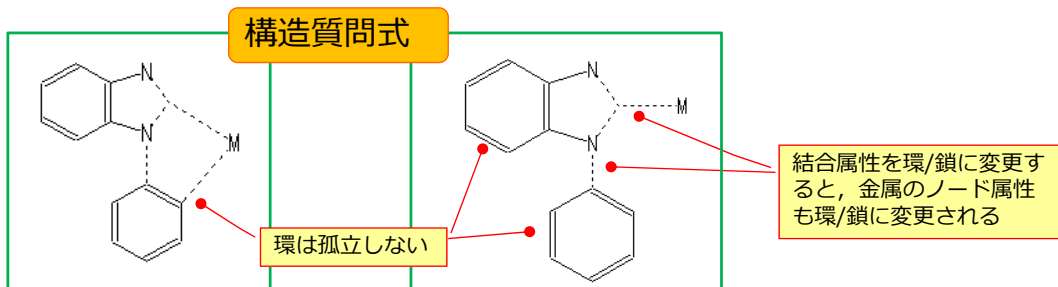
原報中の記載



REGISTRY ファイル中の構造



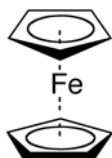
- 結合次数が不明な場合は不定結合を利用する。



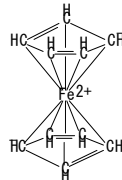
# メタロセン、 $\pi$ -アリル錯体の作図

- REGISTRY ファイルでは、メタロセンや  $\pi$ -アリル錯体は、中心金属と各々の炭素原子が結合した構造で登録される。

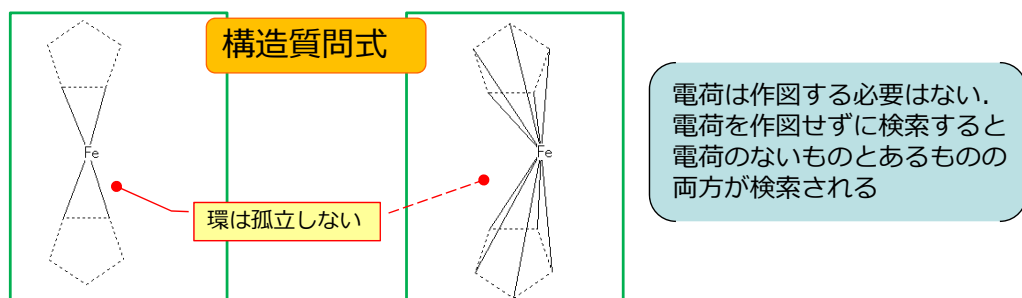
原報中の記載



REGISTRY ファイル中の構造

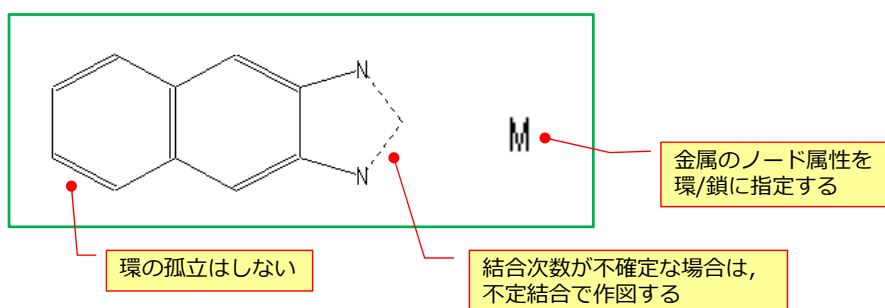


- 配位子の環の孤立化に注意する。



## 結合様式が分からない場合の作図

- 金属と配位子を離して作図する。
  - 一つの作図画面上に二つの構造を離して作図すると、同一物質の同一成分中にその構造が含まれる物質が検索される。



## スクリーンを利用した構造検索

- 配位化合物のスクリーン (2049) を利用して、配位化合物に限定する。

=> FILE REGISTRY

アップロードした構造質問式

スライド 21-24 の構造質問式や、配位子のみ作図した構造質問式など

L1

=> SCR 2049 (配位化合物のスクリーン)

L2

=> L1 AND L2 (サンプル検索)

L3

=> L1 AND L2 FULL (フルファイル検索)

構造質問式とスクリーン番号のL番号をAND演算する

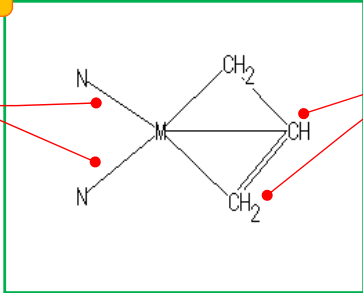
L4

## 検索例 2

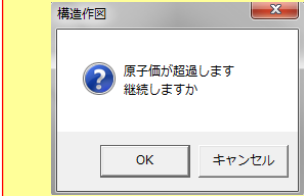
- ジアミン配位子をもつ  $\pi$ -アリル錯体を検索する。
  - 回答が多い場合は、パラジウムを含む物質に限定する。

構造質問式

ジアミン配位子は二座配位子となり金属を含む環構造をとる。そのため、N-M 間の結合属性を環にする



標準でない原子価で作図しようとする、エラーメッセージが表示されるが、検索対象物質に応じた適切な構造であれば、OK をクリックして、そのまま作図する



JAICI  
化学情報協会

26

## 塩，配位化合物の構造検索のまとめ

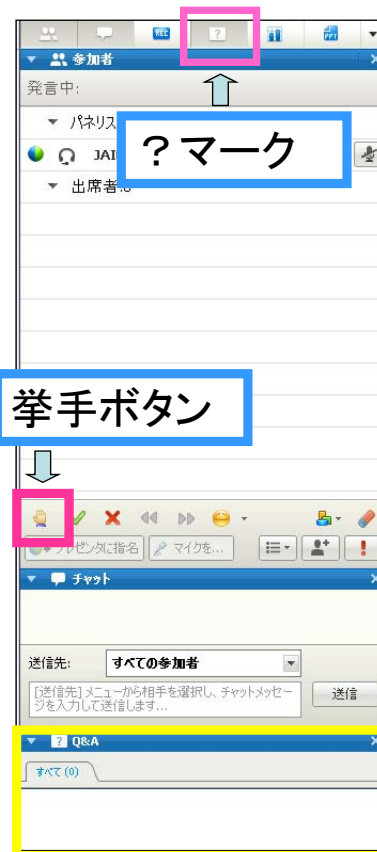
- 塩の検索
  - 各成分別に作図して AND 検索する。
  - 結合属性・ノード属性に注意する。
- 配位化合物
  - 配位子と金属を同一画面上に作図する。
  - 結合次数が不明な場合は不定結合を利用する。
  - 結合属性・ノード属性に注意する。
  - 環の孤立化に注意する。

27

## ご質問はございませんか？



- 質問事項は **Q&A ボックス**に入力して、「主催者」宛てに送信してください。  
\* Q&A ボックスは？マークのアイコンをクリックすると表示されます。
- ご質問に対する回答は、Q&A 欄への返信または音声にてお送りします。  
\* 時間の都合上、セミナー中にすべてのご質問にお答えできない場合があります。
- 複雑なご質問の場合は、ヘルプデスクまでご連絡ください



◆ 検索例 1

=> FILE REGISTRY

← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading C:\Users\~\Documents\STN Express 8.5\Queries\EX1桂皮酸.str

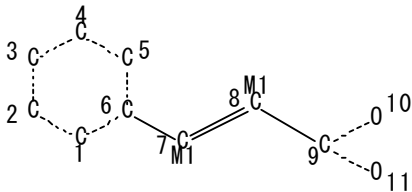
L1 STRUCTURE UPLOADED

← 構造質問式をアップロードする

=> D QUE L1

← アップロードした構造質問式を確認する

L1 STR



NODE ATTRIBUTES:

HCOUNT IS M1 AT 7  
HCOUNT IS M1 AT 8  
NSPEC IS R AT 1  
NSPEC IS R AT 2  
NSPEC IS R AT 3  
NSPEC IS R AT 4  
NSPEC IS R AT 5  
NSPEC IS R AT 6  
NSPEC IS C AT 7  
NSPEC IS C AT 8  
NSPEC IS C AT 9  
NSPEC IS C AT 10  
NSPEC IS C AT 11  
DEFAULT MLEVEL IS ATOM  
MLEVEL IS CLASS AT 7 8 9 10 11  
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RSPEC I  
NUMBER OF NODES IS 11

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=>

Uploading C:\Users\~\Documents\STN Express 8.5\Queries\EX1金属.str

L2 STRUCTURE UPLOADED

← 構造質問式をアップロードする

=> D QUE L2

← アップロードした構造質問式を確認

L2 STR

M 1

NODE ATTRIBUTES:

NSPEC IS C AT 1  
DEFAULT MLEVEL IS ATOM  
MLEVEL IS CLASS AT 1  
DEFAULT ECLEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED  
NUMBER OF NODES IS 1

STEREO ATTRIBUTES: NONE



=> S L1 AND L2 ← 二つの構造質問式を AND 検索 (サンプル検索)  
SAMPLE SEARCH INITIATED 14:24:22 FILE 'REGISTRY'  
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 7398 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 7398 ITERATIONS 37 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

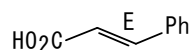
FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 142802 TO 153118  
PROJECTED ANSWERS: 376 TO 1104

L3 37 SEA SSS SAM L1 AND L2

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する

L3 37 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 3-phenyl-, samarium(3+) salt (3:1), (2E)-  
MF C9 H8 O2 . 1/3 Sm

Double bond geometry as shown.



●1/3 Sm(III)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L1 AND L2 FUL ← フルファイル検索を実行する  
FULL SEARCH INITIATED 14:24:45 FILE 'REGISTRY'  
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 149927 TO ITERATE

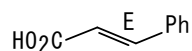
100.0% PROCESSED 149927 ITERATIONS 908 ANSWERS  
SEARCH TIME: 00.00.01

L4 908 SEA SSS FUL L1 AND L2

=> D SCAN

L4 908 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 3-(4-nitrophenyl)-, dysprosium(3+) salt (3:1), (2E)-  
MF C9 H8 O2 . 1/3 Dy

Double bond geometry as shown.

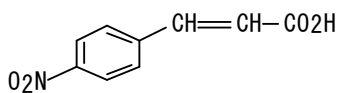


●1/3 Dy(III)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):5

L4 908 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
IN 2-Propenoic acid, 3-(4-nitrophenyl)-, lutetium(3+) salt, hydrate (3:1:6)  
MF C9 H7 N O4 . 2 H2 O . 1/3 Lu

● ————— 3 成分の物質



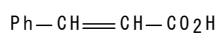
● 1/3 Lu(III)

● 2 H<sub>2</sub>O

L4 908 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 3-phenyl-, homopolymer, zinc salt  
 MF (C<sub>9</sub> H<sub>8</sub> O<sub>2</sub>)<sub>x</sub> . x Zn

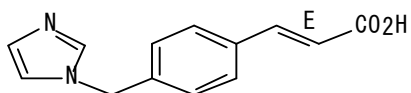
CM 1

CM 2



L4 908 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 3-[4-(1H-imidazol-1-ylmethyl)phenyl]-, calcium salt  
 (2:1), (2E)-  
 MF C<sub>13</sub> H<sub>12</sub> N<sub>2</sub> O<sub>2</sub> . 1/2 Ca

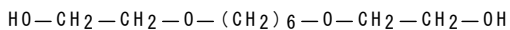
Double bond geometry as shown.



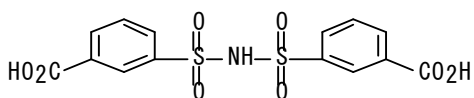
● 1/2 Ca

L4 908 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN Benzoic acid, 3,3'-[iminobis(sulfonyl)]bis-, monosodium salt, polymer with  
 2,2'-[1,6-hexanediylbis(oxy)]bis[ethanol] and  
 3,3'-(1,4-phenylene)bis[2-propenoic acid] (9CI)  
 MF (C<sub>14</sub> H<sub>11</sub> N O<sub>8</sub> S<sub>2</sub> . C<sub>12</sub> H<sub>10</sub> O<sub>4</sub> . C<sub>10</sub> H<sub>22</sub> O<sub>4</sub> . Na)<sub>x</sub>  
 CI PMS

CM 1

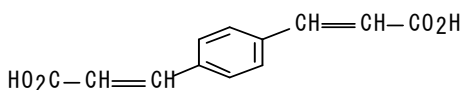


CM 2



● Na

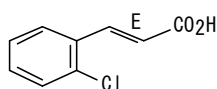
CM 3



● ————— ノイズ (別の酸の塩を含む多成分物質)

L4 908 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 3-(2-chlorophenyl)-, sodium salt, dihydrate, (E)- (9CI)  
 MF C9 H7 Cl O2 . 2 H2 O . Na

Double bond geometry as shown.



● Na

●2 H<sub>2</sub>O

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L4 AND 2/NC  
 L5 597 L4 AND 2/NC

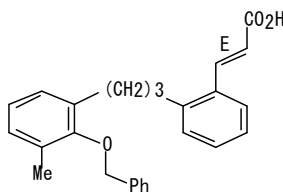
← 2 成分物質に限定する

=> D SCAN

特定の酸の塩のみを得る場合は、二成分物質に限定する。ただし追加の成分が入った物質は除かれる

L5 597 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 3-[2-[3-[3-methyl-2-(phenylmethoxy)phenyl]propyl]phenyl]-  
 , sodium salt (1:1), (2E)-  
 MF **C26 H26 O3 . Na**

Double bond geometry as shown.

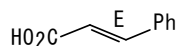


● Na

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):2

L5 597 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 3-phenyl-, europium(3+) salt (3:1), (2E)-  
 MF **C9 H8 O2 . 1/3 Eu**

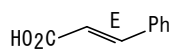
Double bond geometry as shown.



●1/3 Eu(III)

L5 597 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN 2-Propenoic acid, 3-phenyl-, copper(2+) salt (2:1), (2E)-  
 MF **C9 H8 O2 . 1/2 Cu**

Double bond geometry as shown.



●1/2 Cu(II)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

◆ 検索例 2

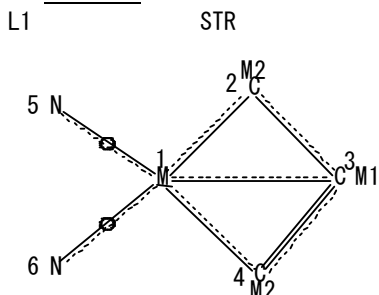
=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=>

Uploading C:\Users\~\Documents\STN Express 8.5\Queries\EX2.str

L1 STRUCTURE UPLOADED ← 構造質問式をアップロードする

=> D QUE L1 ← アップロードした構造質問式を確認する



NODE ATTRIBUTES:

HCOUNT	IS	M2	AT	2
HCOUNT	IS	M1	AT	3
HCOUNT	IS	M2	AT	4
NSPEC	IS	R	AT	1
NSPEC	IS	R	AT	2
NSPEC	IS	R	AT	3
NSPEC	IS	R	AT	4
NSPEC	IS	R	AT	5
NSPEC	IS	R	AT	6

窒素原子 (ノード 5,6) の属性が環 (Ring) になっていることを確認する

DEFAULT MLEVEL IS ATOM  
DEFAULT ELEVEL IS LIMITED

GRAPH ATTRIBUTES:

RING(S) ARE ISOLATED OR EMBEDDED  
NUMBER OF NODES IS 6

STEREO ATTRIBUTES: NONE

=> S L1 ← サンプル検索を実行する

SAMPLE SEARCH INITIATED 16:46:16 FILE 'REGISTRY'

SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED - 37279 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 37279 ITERATIONS

50 ANSWERS

INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)

SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*

BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 734023 TO 757137

PROJECTED ANSWERS: 1181 TO 2299

L2 50 SEA SSS SAM L1

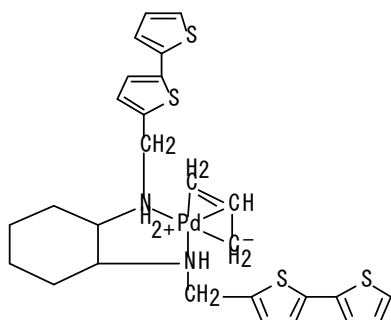
=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式で確認する

L2 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN

IN Palladium(1+), [[N(R), N' (S), 1R, 2R]-N, N' -bis([2, 2' -bithiophen]-5-ylmethyl)-1, 2-cyclohexanediamine-κN, κN'] (η3-2-propenyl)- (9CI)

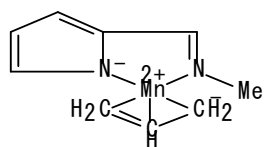
MF C27 H31 N2 Pd S4

CI CCS, COM



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L2 50 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN Manganese, ( $\eta^3$ -2-propen-1-yl) [N-[(1H-pyrrol-2-yl- $\kappa$ N)methylene]methanaminato- $\kappa$ N]-  
 MF C9 H12 Mn N2  
 CI CCS



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行する  
 FULL SEARCH INITIATED 16:46:46 FILE 'REGISTRY'  
 FULL SCREEN SEARCH COMPLETED - 740466 TO ITERATE

100.0% PROCESSED 740466 ITERATIONS  
 SEARCH TIME: 00.00.01

1527 ANSWERS

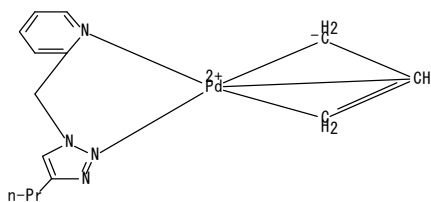
L3 1527 SEA SSS FUL L1

参考：配位化合物のスクリーン (2049) を利用した  
 検索方法

=> FILE REGISTRY  
 L1 STRUCTURE UPLOADED ← 構造質問式  
 => SCR 2049 ← スクリーン  
 L2  
 => S L1 AND L2 ← サンプル検索  
 L3  
 => S L1 AND L2 FUL ← フルファイル検索  
 L4

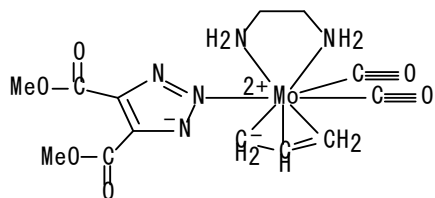
=> D L3 SCAN

L3 1527 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN Palladium(1+), ( $\eta^3$ -2-propen-1-yl) [2-[(4-propyl-1H-1,2,3-triazol-1-yl- $\kappa$ N2)methyl]pyridine- $\kappa$ N]-  
 MF C14 H19 N4 Pd  
 CI CCS, COM

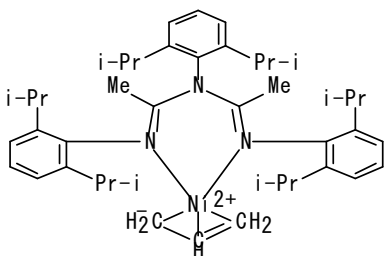


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):3

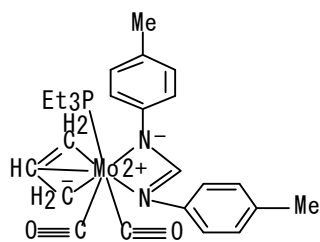
L3 1527 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN Molybdenum, dicarbonyl (4,5-dimethyl  
 1H-1,2,3-triazole-4,5-dicarboxylato- $\kappa$ N2) (1,2-ethanediamine-  
 $\kappa$ N1,  $\kappa$ N2) ( $\eta$ 3-2-propen-1-yl)-  
 MF C13 H19 Mo N5 O6  
 CI CCS



L3 1527 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN Nickel (1+), [N, N'-bis[2,6-bis(1-methylethyl)phenyl]-N-[1-[[2,6-bis(1-  
 methylethyl)phenyl]imino- $\kappa$ N]ethyl]ethanimidamide- $\kappa$ N] ( $\eta$ 3-2-  
 propenyl)- (9CI)  
 MF C43 H62 N3 Ni  
 CI CCS, COM



L3 1527 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN  
 IN Molybdenum, [N, N'-bis(4-methylphenyl)methanimidamido-  
 $\kappa$ N,  $\kappa$ N']dicarbonyl ( $\eta$ 3-2-propenyl) (triethylphosphine)-, stereoisomer (9CI)  
 MF C26 H35 Mo N2 O2 P  
 CI CCS



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L3 AND PD/ELS

← パラジウムを含む物質に限定する

177691 PD/ELS

L4 751 L3 AND PD/ELS

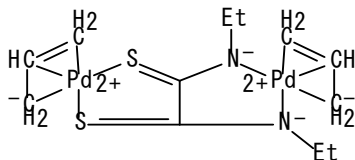
=> D\_SCAN

L4 751 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN

IN Palladium, [ $\mu$ -[N1, N2-diethylethanedithioamidato(2-)- $\kappa$ N1,  $\kappa$ N2: $\kappa$ S1,  $\kappa$ S2]]bis( $\eta$ 3-2-propen-1-yl) di-

MF **C12 H20 N2 Pd2 S2**

CI CGS



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

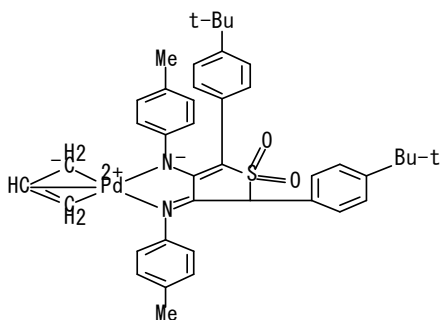
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 2

L4 751 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN

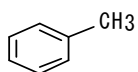
IN Palladium, [[2, 5-bis[4-(1, 1-dimethylethyl)phenyl]-4, 5-dihydro-N-(4-methylphenyl)-4-[(4-methylphenyl) imino- $\kappa$ N]-3-thiophenamine- $\kappa$ N3] 1, 1-dioxidato]( $\eta$ 3-2-propen-1-yl)-, compd. with methylbenzene (2:1)

MF **C41 H46 N2 O2 Pd S . 1/2 C7 H8**

CM 1



CM 2

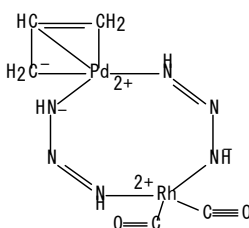


L4 751 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2015 ACS on STN

IN Rhodium(1+), dicarbonyl[( $\eta$ 3-2-propenyl)palladium]bis[ $\mu$ -(1-triazenato- $\kappa$ N1: $\kappa$ N3)]- (9CI)

MF **C5 H9 N6 O2 Pd Rh**

CI CGS



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): END