

CAS SciFinder®

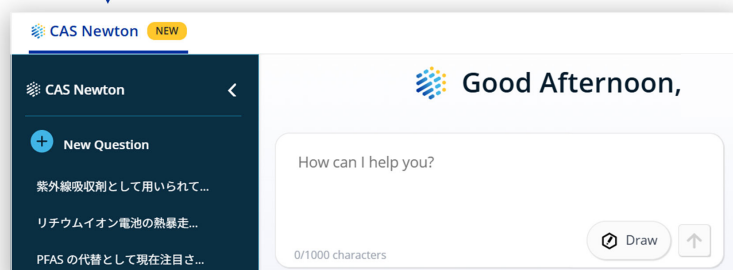
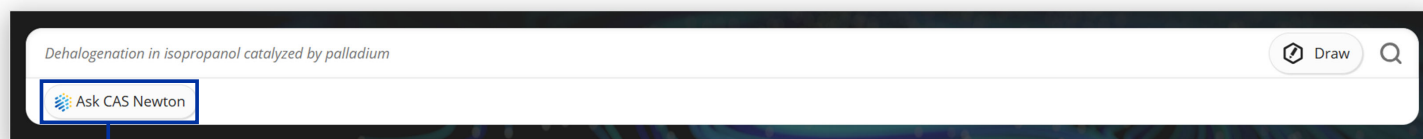
CAS Newton 概要

JAIICI
化学情報協会

CAS
A division of the
American Chemical Society

CAS Newton とは

自然言語で質問できる、研究者向け会話型 AI エージェント



- 日本語を含む多言語に対応した会話型 AI
- 自然言語を使って膨大な CAS のデータベースを検索可能
- データ探索や整理の手間を軽減
- 追加質問による深掘りにも柔軟に対応

※CAS Newton は、CAS SciFinder に収録されている CAS が作成した高精度なコンテンツのみを検索対象としており、外部の情報は一切使用していません。また、お客様が入力された情報が学習に利用されることは一切ありません。

1 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



CAS Newton の特長

CAS による人手の索引を活用した AI 検索結果

検索結果や物質の詳細を CAS SciFinder で表示できる

化学構造と組み合わせた質問が可能

紫外線吸収剤として用いられている低分子化合物を検索してください。

紫外線吸収剤として用いられている低分子化合物を検索しました。CAS SciFinder には紫外線吸収剤として使用される低分子化合物 (22,956) が登録されています。

以下は、日焼け止め製品などに広く使用されている代表的な紫外線吸収剤です：

主要な有機紫外線吸収剤

- ベンゾフェノン系**
 - 2-Hydroxy-4-methoxybenzophenone (CAS 131-57-7) (オキシベンゾン)
 - 分子式: $C_{14}H_{12}O_3$
 - 参考文献数: 10,630件
- 桂皮酸 (シンナメート) 系**
 - 2-Ethylhexyl 4-methoxycinnamate (CAS 5466-77-3) (オクチノキザート)
 - 分子式: $C_{18}H_{26}O_3$

その中で、この骨格を有する化合物を検索してください。

Filter Results: 22,956 Results

CAS Registry Number: 5466-77-3

2-Propenoic acid, 3-(4-methoxyphenyl)-, 2-ethylhexyl ester (INCI: ACI)

2 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



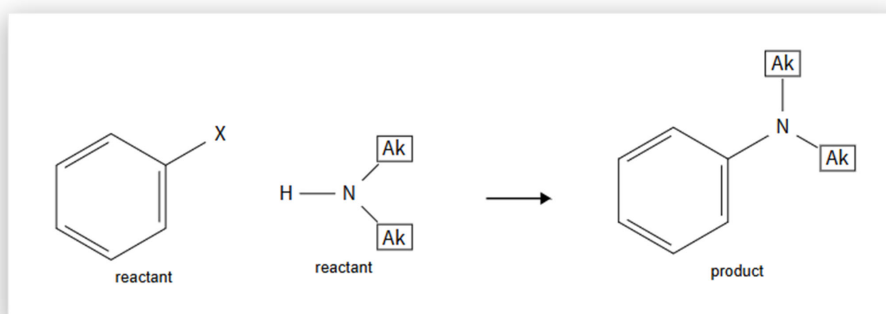
検索例 ①：合成系研究者向け BUCHWALD-HARTWIG 反応における Pd 触媒の検討

3 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

下記 Buchwald-Hartwig 反応のパラジウム触媒を検討する



- 高収率が報告されているパラジウム触媒の検索
- 反応条件の確認
- カタログ情報の検索

4 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



検索の流れ

高収率が報告されているパラジウム触媒の検索

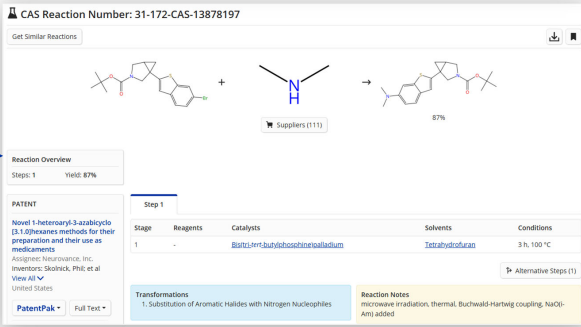
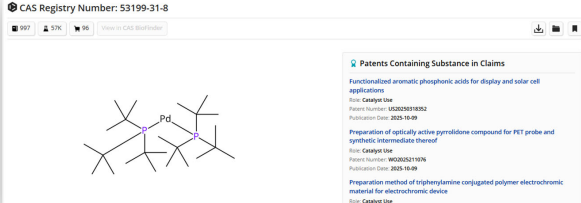
化学構造と組み合わせての質問も可能

この構造を持つBuchwald-Hartwig反応について、高収率が報告されているパラジウム触媒を教えてください。

ご提供いただいた構造を含むBuchwald-Hartwig反応について、CAS SciFinder内で高収率が報告されているパラジウム触媒を見つけました。

高収率を達成したパラジウム触媒

- Bis(tri-*tert*-butylphosphine)palladium (CAS 53199-31-8)**
 - 収率: 87%
 - 反応: 31-172-CAS-13878197
 - この触媒は芳香族ハロゲン化物と窒素求核剤の置換反応 (Buchwald-Hartwig型反応) で優れた性能を示しました
- Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium (CAS 51364-51-3)**
 - 収率: 86%
 - 反応: 31-614-CAS-42433009
 - 配位子として1,1'-(9,9-Dimethyl-9H-xanthene-4,5-diyl)bis[1,1-diphenylphosphine] (CAS 161265-03-8) (Xantphos)と組み合わせて使用



検索の流れ

反応条件の確認とカタログ情報の検索

反応条件の確認

この結果の中で、53199-31-8 を触媒に使った反応条件を教えてください。

Bis(tri-*tert*-butylphosphine)palladium (CAS 53199-31-8) を触媒とする反応条件のまとめ

ご提供いただいた構造を含む反応で、Bis(tri-*tert*-butylphosphine)palladium (CAS 53199-31-8) を触媒として使用した反応は40件見つきました。

典型的な反応条件パターン

パターン1: マイクロ波照射法 (最も一般的)

収率: 63-87%

- 触媒: Pd(*t*-BusP)₂ (6-8 mol%)
- 塩基: NaO(*i*-Am) または KOtBu
- 溶媒: THF中のジメチルアミン溶液 (20%)
- 温度: 100°C
- 時間: 3時間
- 加熱方法: マイクロ波照射

代表例: 31-172-CAS-11498292 (収率87%)

パターン2: 通常加熱法 (トルエン系)

収率: 81-100%

[CAS SciFinder へのリンク](#)

カタログ情報の検索

53199-31-8 を日本で購入できるカタログ情報を教えてください。

Bis(tri-*tert*-butylphosphine)palladium (CAS 53199-31-8) の日本での購入情報

日本国内で14件のカタログ情報が見つかりました。主要なサプライヤーは以下の通りです。

- TCI Research Chemicals (最もお勧め)**

[CAS SciFinder へのリンク](#)

 - 製品名: Bis(tri-*tert*-butylphosphine)palladium(0)
 - 製品番号: B3161
 - 純度: 95-98%
 - 在庫状況: 常時在庫あり (Maintained in stock)
 - 価格:
 - 250 mg: ¥11,000
 - 1 g: ¥31,400
 - 購入リンク: TCI公式サイト

推奨理由: 常時在庫があり、純度が高く、価格も比較的リーズナブルです。
- KANTO CHEMICAL (関東化学)**

KANTO CHEMICAL

 - 製品名: Bis(tri-*tert*-butylphosphine)palladium(0)
 - 製品番号: 36350-1A

検索例 ②：メディシナルケミスト向け HER2 阻害剤に有効な分子骨格の検討

7

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

HER2 阻害剤に有効な分子骨格を解析し、具体的に報告されている物質を検索する

- 論文で報告されている HER2 阻害剤の分子骨格の解析
- それぞれの分子骨格のメリット・デメリットと選択性向上に寄与する置換基や置換位置の解析

HER2 阻害剤に関する論文の中で、活性向上や選択性改善と関連づけて議論されている分子骨格を抽出し、それぞれの分子骨格について報告されているメリット・デメリット、および選択性向上に寄与すると考えられている置換基や置換位置の共通点をまとめてください。

- 検索した論文に記載のキナゾリン骨格を持った物質の抽出

検索した論文に記載の物質の中で、HER2 阻害剤として議論されているキナゾリン骨格を持った物質を検索してください。

8

© 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



検索の流れ

HER2 阻害剤の分子骨格の解析

HER2 阻害剤に関する論文の中で、活性向上や選択性改善と関連づけて議論されている分子骨格を抽出し、それぞれの分子骨格について報告されているメリット・デメリット、および選択性向上に寄与すると考えられている置換基や置換位置の共通点をまとめてください。

検索結果から得られた情報を基に、HER2阻害剤の主要な分子骨格とその構造活性相関をまとめます。

HER2阻害剤の分子骨格と構造活性相関 (SAR) の総括

検索結果から、HER2阻害剤に関する重要な分子骨格と、それらの活性向上・選択性改善に関する知見をまとめました。[HER2阻害剤に関する12,830件の論文](#)から以下の情報が抽出されました。

1. キナゾリン骨格 (Quinazoline)

CAS SciFinder へのリンク

メリット:

- EGFR/HER2二重阻害活性を示す
- FDA承認薬 (ゲフィチニブ、エルロチニブ、アフマチニブ等) の基本骨格
- 合成が比較的容易で多様な誘導体化が可能

デメリット:

- 野生型EGFRへの阻害活性が高く、選択性に課題
- 下痢や皮膚発疹などの副作用

解析の結果、HER2 阻害剤の分子骨格としてキナゾリンが見つかった → 次スライド

選択性向上のための構造的特徴:

- C-4位のアニリン部分:** 3-クロロ-4-(3-フルオロベンジル)オキシアニリン構造がHER2選択性を向上
- C-6位の置換基:** フラニル基やイソキノリン基の導入により選択性が改善
- ハロゲン置換:** 3-クロロ-4-アルコキシアニリン構造が重要
- 研究例: 化合物7cはIC₅₀ 8 nMでHER2を阻害し、ラパチニブより240倍高いEGFR選択性を示した

2. ピラゾロピリミジン骨格 (Pyrazolo[3,4-d]pyrimidine)

メリット:

- EGFR T790M変異とHER2の二重阻害活性
- ナノモル濃度での強力な抗腫瘍活性
- 抗けいれん作用も併せ持つ

デメリット:

- 代謝安定性に課題がある場合がある

選択性向上のための構造的特徴:

- トリアゾール環との融合構造
- 4位のアニリン置換基の最適化
- IC₅₀値: HCT-116細胞で4.80 nM、MCF-7細胞で6.50 nM

3. チエノピリミジン骨格 (Thieno[3,2-d]pyrimidine)

回答の続き

検索の流れ

検索した論文に記載のキナゾリン骨格を持った物質の抽出

検索した論文に記載の物質の中で、HER2 阻害剤として議論されているキナゾリン骨格を持った物質を検索してください。

キナゾリン骨格を持つHER2阻害剤関連物質の検索結果

HER2阻害剤に関する論文に記載されているキナゾリン骨格を持つ物質を検索した結果、68件の物質が見つかりました。

検索結果へのアクセス

キナゾリン骨格を持つHER2阻害剤関連物質68件

主要なキナゾリン系HER2阻害剤 (上位10件)

以下は、関連性スコアが高い順に並べた主要な物質です:

1. FDA承認薬

1. Lapatinib (CAS 231277-92-2) - スコア: 2783

- 分子式: C₂₃H₂₆ClFN₄O₅
- EGFR/HER2二重阻害剤 (FDA承認)

2. Gefitinib (CAS 184475-35-2) - スコア: 1422

- 分子式: C₂₂H₂₄ClFN₄O₃
- EGFR阻害剤 (FDA承認)

CAS SciFinder で検索結果を確認

Substances

View Related Results

Filter Results

Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Search for up to 3 structures within the result set.

Draw

Reaction Role

Reference Role

Life Science Data

Commercial Availability

Number of Components

Molecular Weight

LogP

Stereochemistry

68 Results

1

231277-92-2

C₂₃H₂₆ClFN₄O₅
Lapatinib

8,037 460 83

2

184475-35-2

C₂₂H₂₄ClFN₄O₃
Gefitinib

16K 896 107

4

850140-72-6

C₂₃H₂₆ClFN₄O₅
Afatinib

4,892 321 90

5

183319-69-9

C₂₂H₂₃N₄O₄ClH
Components: 2
Component RN: 183321-74-6
Erlotinib hydrochloride

6,104 407 97

検索例 ③：材料系研究者向け 撥水・撥油性に優れた PFAS 代替ポリマーの検討

11 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



検索例

撥水・撥油性に優れた PFAS 代替ポリマーを検討する

- PFAS 代替ポリマーの検索
- 性能 (撥水・撥油性) による限定
- 特定の PFAS 代替ポリマーの合成方法の検索

12 © 2026 American Chemical Society. All rights reserved.



検索の流れ

PFAS 代替ポリマーの検索

PFAS代替として注目されているポリマーを教えてください

CAS Content Collectionで検索した結果、PFAS（パー・ポリフルオロアルキル物質）の代替として注目されているポリマーについて、以下の情報が見つかりました。

主なPFAS代替ポリマー

1. 生分解性ポリマー

食品包装用途では、以下のポリマーが研究されています：

- ポリ乳酸（PLA） - 最も実用的な代替品として評価されていますが、性能と堆肥化性には改善の余地があります

3. シリコン系代替品

- Poly(dimethylsilanediol) (CAS 31900-57-9)**
- シリルシラン置換ポリマー - シロキサン加水分解不安定性を克服した新しい材料

重要な研究論文

- 2021:1750354 - 食品包装用紙におけるPFASとその代替品に関する包括的レビュー
- 2024:45477 - バイオマテリアルを用いたPFAS樹脂除去の新しいアプローチ
- 2024:798354 - エネルギーハーベスティング用のフッ素ポリマー代替品

CAS Registry Number: 31900-57-9

CAS SciFinder の物質情報

1964-04-08 CASREGD

(C₂H₆O₂Si)_n
Siloxane, U-1-dimethyl-, homopolymer (423)

Patents Containing Substance in Claims

Transfer substrate, method of manufacturing the transfer substrate, and wet transfer method for semiconductor chip
Patent Number: WO2023020274
Publication Date: 2023-01-19

Gas diffusion layer with enhanced pore structure and electrochemically deposited microporous layer and to preparing method
Patent Number: WO202308003
Publication Date: 2023-03-19

A system for evaluating biodegradability of biodegradable materials by measuring pH, temperature, and current variations
Patent Number: WO202304665
Publication Date: 2023-02-02

View All Patents

Alternatives to Fluoropolymers for Motion-Based Energy Harvesting, Ferroelectrics, and Flexoelectricity

CAS SciFinder の文献情報

By: Shirell, Peter C.; Suijs, Annik; Tmusk, Martin; Suijs, Andris
DOI: 10.1002/eml.202311570

In This Reference

- CAS Concise
- Substances
- Cited Documents

A review. Fluoropolymers, including polytetrafluoroethylene (PTFE, Teflon), polyvinylidene difluoride (PVDF), and fluorine kautschuk materials (FKMs, Viton) are critical polymers for applications ranging from non-stick coatings, corrosion resistant seals, semiconductor manufacturing, membranes, and energy harvesting technologies. However, the synthesis of these fluoropolymers requires the use of per- and polyfluorinated alkyl substances (PFAS) known colloquially as "forever chemicals," and so such there is a pressing need to develop alternative technologies that can serve the end use of fluoropolymers without the environmental cost of using PFAS. Further, fluoropolymers themselves fall under the PFAS umbrella. Here alternative mech-to-electric energy harvesting polymers are reviewed and benchmarked against the leading fluoropolymer energy harvesters. These alternative technologies include nonfluoropolymer piezoelectric polymers, triboelectric nanogenerators (TENGs), ferroelectric elastomers, and flexoelectric polymers. A vision towards sustainable, non-fluoropolymer-based energy harvesting is provided.

Keywords: review fluoropolymer piezoelectricity triboelectricity ferroelectric flexoelectricity energy harvesting; energy harvesting; ferroelectric; fluoropolymers; piezoelectric; triboelectric

Open Access Full Text



検索の流れ

性能による比較と合成法の検索

- 性能 (撥水・撥油性) による限定

この結果のなかで撥水・撥油性に優れたPFAS代替ポリマーを性能ごとに比較し、表にしてください。

検索結果から、撥水・撥油性に優れたPFAS代替ポリマーについて詳しくご説明します。

撥水・撥油性に優れたPFAS代替ポリマー

1. シリルシラン置換ポリマー (最新技術)

ポリ(トリス(トリメチルシリル)シリル)プロピルメタクリレート (P-silyl)

- 2025:2481037 および 2026:435644

性能比較まとめ

ポリマータイプ	撥水性	撥油性	化学安定性	環境性
シリルシラン置換	◎	◎	◎	◎
短鎖フッ素化 (C6以下)	◎	=	◎	△
キトサン-PDMS	◎	=	◎	◎
オクチルシラン-PDMS	◎	△	=	◎
従来のシリコン	=	△	△	=

重要な知見

CAS SciFinder へのリンク

より詳しい情報は、32件の撥水・撥油性PFAS代替ポリマーに関する文献をご覧ください。

- 特定の PFAS 代替ポリマーの合成方法の検索

ポリ(トリス(トリメチルシリル)シリル)プロピルメタクリレート (P-silyl) の合成法を教えてください

ポリ(トリス(トリメチルシリル)シリル)プロピルメタクリレート (P-silyl) の合成法について、詳細な情報をご説明します。

P-silylの合成法

主要文献

2025:2481037 反応の出典文献へのリンク

合成プロセス

ステップ1: モノマー合成

3-[トリス(トリメチルシリル)シリル]プロピルメタクリレート (M-silyl, TTMSiSi-PMA)

モノマーの構造の特徴：

- Si-Si結合を含む (従来のシロキサンのSi-O-Si結合の代わりに)
- メタクリレート基による重合可能性
- トリス(トリメチルシリル)シリル基による低表面エネルギー

構造式 (概念図)：

$$(CH_3)_3Si-Si-Si(CH_3)_3$$
