

世界最大の分析手法，合成手順データベース

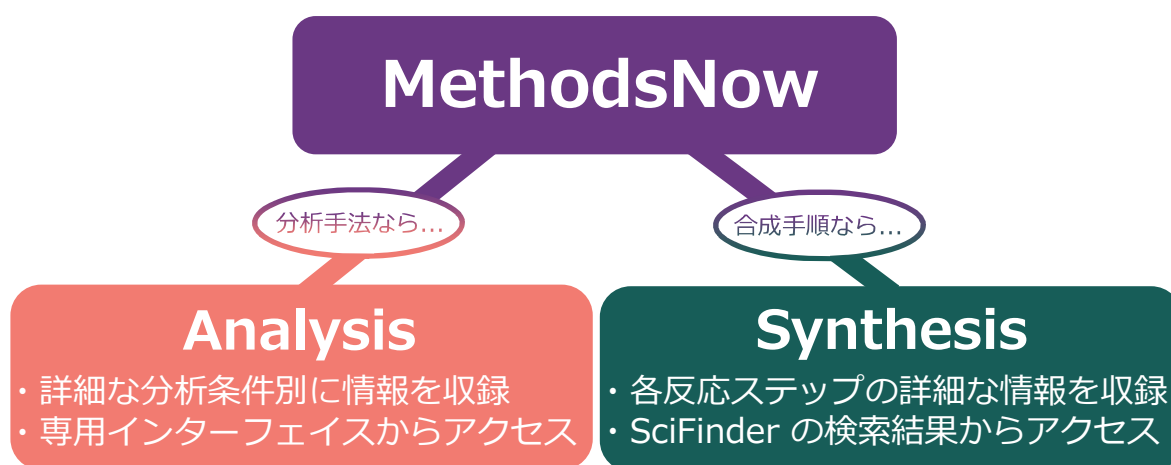


METHODSNow™

A CAS SOLUTION



MethodsNow は，米 Chemical Abstract Service (CAS) が作成する世界最大の実験プロトコルデータベースです。



分析手法，合成手順を
簡単に，素早く，正確に検索！

特長 1 : 分析手法の詳細情報を検索, 表示

Analysis

専用のインターフェイスからアクセス!

詳細な手法, バリデーションを分かりやすく表示!

- レコード内容
- 分析に用いた物質情報
 - 出典 (論文タイトル, 著者名, 雑誌名, 抄録)
 - 使用機器
 - 条件
 - 分析手法
 - バリデーション

- キーワード検索やカテゴリ検索, 絞り込み機能により柔軟な検索ができます。
- 分析手法に関する物質の詳細, 出典, 使用機器, 手順など詳しい内容を確認できます。
- 分析に用いた物質の構造や CAS 登録番号も併せて確認できます。
- 複数の検索結果を一画面で比較でき, PDF, XLS 形式で保存できます。

特長 2 : 詳細な合成手順を見やすく表示

SciFinder[®]
標準搭載

Synthesis

Structure Editor

Drag the reaction arrow to specify reaction direction.

SciFinder の反応検索結果からワンクリックで表示

Get reactions where the structure(s) is/are:

- Variable positions
- Substructures of more complex structures

Overview

Experimental Procedure

Step 1

9-Anthrylboric acid (7). To a 100 mL two-necked flask containing a solution of 9-bromoanthracene (642 mg, 2.5 mmol) in dried THF (20 mL) equipped with a magnetic stirrer, a N₂ purge, and a -78 °C acetone-dry ice bath was added t-BuLi (2.5 mL, 3.75 mmol, 1.5 M) with good stirring. After the mixture was stirred for 1 h, trimethyl borate (0.43 mL, 3.75 mmol) was added. After a further 2 h of stirring, water was first added to the reaction mixture and then HCl (6 M) was added in a dropwise fashion until an acidic mixture was obtained. The reaction mixture was poured into water and extracted with CH₂Cl₂ (3 × 50 mL). The combined organic layer was dried with anhydrous Na₂SO₄ and evaporated to give 2.

MethodsNow™

Procedure

1. Add t-BuLi (2.5 mL, 3.75 mmol, 1.5 M) to a 100 mL two-necked flask containing a solution of 9-bromoanthracene (642 mg, 2.5 mmol) in dried THF (20 mL) equipped with a magnetic stirrer, a N₂ purge and a -78 °C acetone-dry ice bath with good stirring.
2. Stir the mixture for 1 hour, add trimethyl borate (0.43 mL, 3.75 mmol) to the mixture.

View more...

Available Experimental Data

¹H NMR, HRMS, State

View with MethodsNow

MethodsNow Step 1

Reaction Steps 1 2 3

MethodsNow Step 2

Reaction Steps 1 2 3

MethodsNow Step 3

Reaction Steps 1 2 3

多段階反応もステップ毎に収録!

Products	9-Anthracene-2-thiophenecarboxaldehyde, 100%, CAS RN: 1227513-03-2
Reactants	Anthracene-9-ylboronic acid, 100%, CAS RN: 1227513-02-1
Reagents	Hydroxybis(trimethylsilyloxy)borane, 100%, CAS RN: 1227513-01-1
Solvents	Water, Tetrahydrofuran, 100%, CAS RN: 3689-00-2
Procedure	1. Add 9-anthracene-2-thiophenecarboxaldehyde (15 mmol) to a 100 mL two-necked flask containing a solution of 9-bromoanthracene (642 mg, 2.5 mmol) in dried THF (20 mL) equipped with a magnetic stirrer, a N ₂ purge, and a -78 °C acetone-dry ice bath with good stirring. After the mixture was stirred for 1 h, trimethyl borate (0.43 mL, 3.75 mmol) was added. After a further 2 h of stirring, water was first added to the reaction mixture and then HCl (6 M) was added in a dropwise fashion until an acidic mixture was obtained. The reaction mixture was poured into water and extracted with CH ₂ Cl ₂ (3 × 50 mL). The combined organic layer was dried with anhydrous Na ₂ SO ₄ and evaporated to give 2.
Scale	milligram
¹ H NMR	400 MHz, CDCl ₃ , ppm δ 10.03 (s, 1H), 8.15 (d, J = 3.6 Hz, 1H), 8.07 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 7.67 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 7.48-7.41 (m, 4H), 7.35 (d, J = 3.6 Hz, 1H).
HRMS	[M] ⁺ calcd. for C ₁₉ H ₁₁ BrOS, 365.9714; found, 365.9710.
State	pale-yellow solid.
CAS Method Number	3-084-CAS-914666

レコード内容

- 生成物
- 反応物
- 試薬
- 溶媒
- 合成手順
- スケール
- スペクトルデータ
- 状態
- CAS Method Number

合成手順, スペクトルデータなど表形式で見やすく表示!

Print/Export Close

- 従来の Experimental Procedure よりも合成に関する詳しい内容を確認できます。
- 従来では収録対象外であった雑誌論文 (Elsevier, Wiley, RSC etc.) からも収録。
- 一段階反応はもちろん, 多段階反応の合成手順もステップ毎に収録。
- 検索結果は PDF, XLS 形式で保存できます。

MethodsNow 収録内容

Analysis

収録件数	47 万件以上 (2018 年 2 月現在)
収録期間	2000 年 ~
収録分野	医学分野, 農学分野, 化学分野を中心とし, その他周辺分野も収録
収録雑誌例	<ul style="list-style-type: none"> • Food Chemistry • Journal of Chromatography A • Journal of Chromatography B • Journal of Agricultural and Food Chemistry • Talanta • Analytica Chimica Acta など

Synthesis

収録件数	450 万件以上 (2018 年 2 月現在)
収録期間	2000 年 ~
収録分野	低分子有機合成反応
収録雑誌例	<p>ASC, Springer, Taylor & Francis, Wiley, RSC, Elsevier 発行の 180 誌以上の雑誌および WO 公報 (2010 年以降) が収録対象</p> <ul style="list-style-type: none"> • Organic Letters • Catalysis Letters • Journal of Coordination Chemistry • Journal of Medical Chemistry • Journal of the American Chemical Society • Angewandte Chemie • Tetrahedron • Chemical Science など

無料トライアル実施中！是非お問い合わせください

MethodsNow の詳細は情報事業部 マーケティンググループへ
お気軽にお問い合わせください。