



METHODSNOW™

A CAS SOLUTION

in  SciFinder®

SciFinder を MethodsNow オプション付きでご契約いただくと、下記の 2 つの機能が利用できます。

MethodsNow: Synthesis 



P.1 –P.3

MethodsNow: Analysis 



P.4 –P.7

MethodsNow: Synthesis

SciFinder で検索した反応について、詳細な実験手順を見やすく表示する機能です。

特長

- ・ SciFinder の反応検索結果について、反応の操作手順をステップごとに確認！
- ・ 人手で整理された分かりやすい情報！
- ・ PDF や XLS 形式でのダウンロードも可能！



原報を見なくても、SciFinder 上で詳細な実験手順や生成物のスペクトルデータが確認できます！

有機合成系の研究者に最適の機能です！

コンテンツ詳細

操作手順収録数	100 万件以上 (2016 年 2 月現在) * 今後も追加予定
収録期間	2000 年～
収録分野	低分子有機合成反応
言語	英語
収録雑誌	ACS, 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 <例> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Organic Letters ▪ Catalysis Letters ▪ Journal of Coordination Chemistry, ▪ Journal of Medicinal Chemistry ▪ Journal of the American Chemical Society ▪ Angewandte Chemie ▪ Tetrahedron ▪ Chemical Science など

利用イメージ

CAS Solutions
Preferences | SciFinder Help | Sign Out

SciFinder の反応検索結果画面

Explore
Saved Searches
SciPlanner

Reaction Structure substructure > reactions (21)

REACTIONS Get References Tools

Analyze Refine Group by: No Grouping Sort by: Number of Steps

Analyze by: MethodsNow

MethodsNow Not Available 12

MethodsNow Available 9

[Show More](#)

0 of 21 Reactions Selected Page: 1 of 2

1. [View Reaction Detail](#) [Link](#)

5 Steps *Hover over any structure for more options.*

~47

~195

[Step 2.1]
~139

[Step 4.1]
~10

Overview

METHODSNow™

Procedure

1. Add N-phenyl bis(trifluoromethanesulfonimide) (14.9 g, 41.7 mmol), N,N-disopropylethylamine (7.05 mL, 42.7 mmol) to 7-hydroxy-4-methoxycarbonylmethyl-2H-chromen-2-one (8.00 g, 34.2 mmol) in acetonitrile (80 mL) at room temperature.
2. Stir the resulting mixture for 15 minutes at room temperature.

[View more...](#)

Available Experimental Data

¹H NMR, ¹³C NMR, IR, HRMS, Mass Spec, MP

[View with MethodsNow](#)

MethodsNow の実験手順は反応検索結果中に表示されます

[View with MethodsNow](#) ➔ MethodsNow 画面 (次ページ) が開きます

MethodsNow

7-Triazolycoumarin-based fluorescent tag system for stepwise, comparative assessment of small molecule microarrays

By Jeon, Moon-Kook; Kang, Myoung-Ku; Park, Koon Ha
From Tetrahedron, 68(30), 6038-6053; 2012

Reaction Steps 1 2 3 4 5

MethodsNow

7-Triazolycoumarin-based fluorescent tag system for stepwise, comparative assessment of small molecule microarrays

By Jeon, Moon-Kook; Kang, Myoung-Ku; Park, Koon Ha
From Tetrahedron, 68(30), 6038-6053; 2012

Reaction Steps 1 2 3 4 5

Products

Reactants

Reagents

Solvents

Procedure

Scale

¹H NMR

¹³C NMR

IR

HRMS

Mass Spec

MP

CAS Method Number

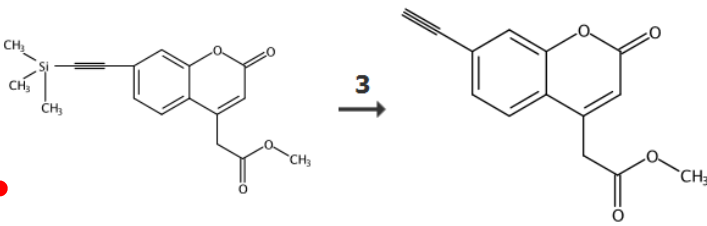
MethodsNow

7-Triazolycoumarin-based fluorescent tag system for stepwise, comparative assessment of small molecule microarrays

By Jeon, Moon-Kook; Kang, Myoung-Ku; Park, Koon Ha
From Tetrahedron, 68(30), 6038-6053; 2012
Published by Elsevier Ltd.

Reaction Steps 1 2 3 4 5

MethodsNow 画面



Products	2#-1-Benzopyran-4-acetic acid, 7-ethynyl-2-oxo-, methyl ester, 82%, CAS RN: 1384966-73-7
Reactants	2#-1-Benzopyran-4-acetic acid, 2-oxo-7-[2-(trimethylsilyl)ethynyl]-, methyl ester, CAS RN: 1384966-72-6
Reagents	Potassium carbonate, CAS RN: 584-08-7
Solvents	Methanol, CAS RN: 67-56-1
Procedure	<ol style="list-style-type: none"> 1. Add potassium carbonate (255 mg, 1.85 mmol) to 4-methoxycarbonylmethyl-7-trimethylsilylethynyl-2H-chromen-2-one (526 mg, 1.67 mmol) in methanol (20 mL) at room temperature. 2. Stir the mixture for 10 minutes at room temperature. 3. Partition the mixture between ethyl ether and water. 4. A prolonged reaction time resulted in decomposition. 5. Dry the organic layer over magnesium sulfate. 6. Evaporate the organic layer in vacuo.
Scale	milligram
¹ H NMR	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): δ = 7.52 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.45 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 7.39 (dd, J = 8.2 and 1.2 Hz, 1H), 6.40 (s, 1H), 3.77 (s, 2H), 3.74 (s, 3H), 3.27 ppm (s, 1H).
¹³ C NMR	¹³ C NMR (125 MHz, CDCl ₃): δ = 169.0, 159.9, 153.5, 147.3, 128.2, 126.2, 124.6, 120.8, 119.3, 117.9, 82.1, 81.0, 53.0, 38.0 ppm.
IR	IR (ATR, neat): ν = 3293, 3231 (C≡C-H), 3066, 2958, 2106 (C≡C), 1711 (2C=O, overlapped), 1610, 1337, 1236, 1203, 1178, 1141, 996, 987, 878, 829 cm ⁻¹ .
HRMS	HRMS (EI): m/z calculated for C ₂₄ H ₁₀ O ₄ : 242.0579 [M ⁺]; found: 242.0580.
Mass Spec	MS (ESI): m/z: 243 [M+H ⁺].
MP	141.1±0.1 °C.
CAS Method Number	3-529-CAS-78335

Print/Export Close

反応ステップごとに
情報がまとめられて
います

実験手順、スペクトルデータなどが
見やすい表形式でまとめられています

PDF または XLS 形式で
ダウンロードできます

MethodsNow: Analysis



MethodsNow: Analysis は、詳細な分析手順、測定機器、検証データなどを調査・比較できるツールです。

特長

- ・ 膨大な文献コレクションから、分析手法に特化し情報を抽出！
- ・ 分析手法の概要を簡単に把握できるよう、項目別に情報を整理！
- ・ 複数の分析手法を、同一画面で比較検討できる！
- ・ 文献に含まれる分析手法を、読んで理解する時間を大幅に削減でき、効率アップ！



試験 同定 単離 測定
精製 分離 抽出

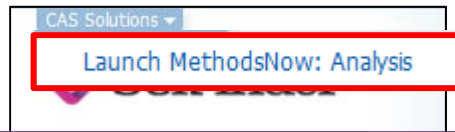
これらの方法を調べたい…と思った方は
MethodsNow: Analysis が最適です！

コンテンツ詳細

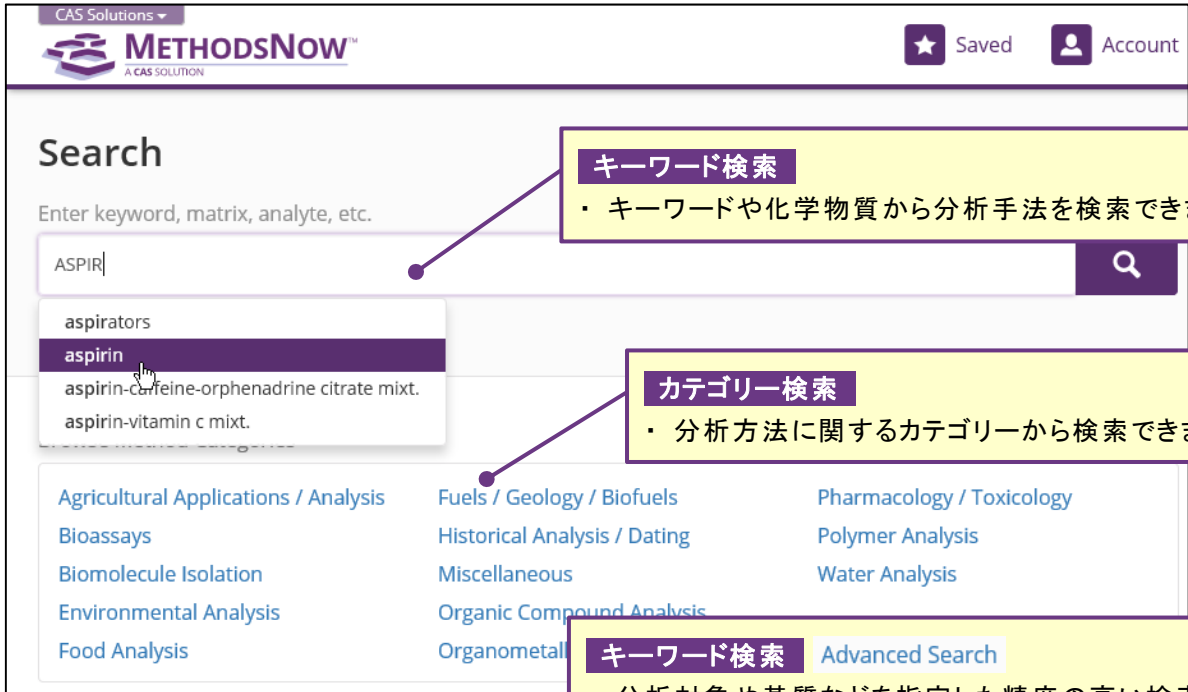
CAplus ファイルに収録された、化学および周辺分野の文献情報を基に MethodsNow Analysis は作られています。

分析手法数	約 15 万件 (2016 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
言語	英語
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

検索



SciFinder 画面の左上にある「CAS Solutions」から
MethodsNow: Analysis 画面に切り替え、ログインします



キーワード検索

・ キーワードや化学物質から分析手法を検索できます。

カテゴリ検索

・ 分析方法に関するカテゴリから検索できます。

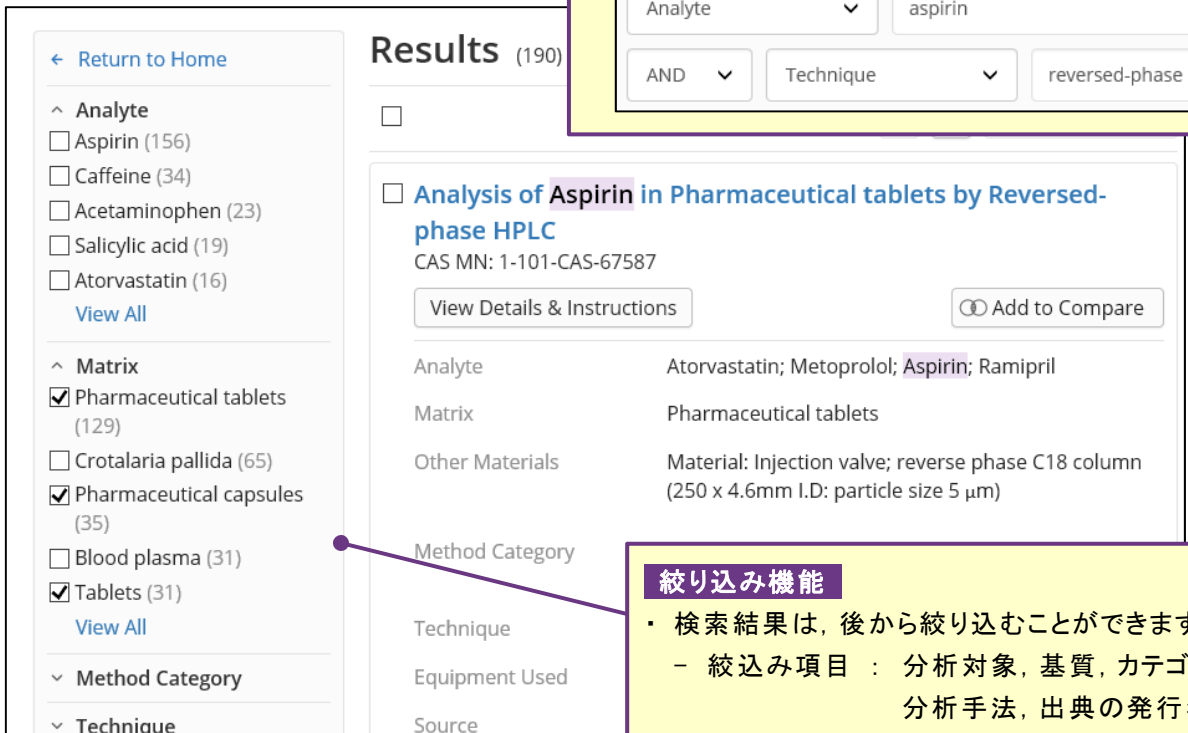
キーワード検索

Advanced Search

・ 分析対象や基質などを指定した精度の高い検索や、
複数の項目を組み合わせた柔軟な検索ができます。

Analyte

AND



絞り込み機能

・ 検索結果は、後から絞り込むことができます。
- 絞り込み項目 : 分析対象, 基質, カテゴリー,
分析手法, 出典の発行年

検索結果の詳細表示

タイトル

Analysis of Aspirin in Pharmaceutical tablets by Reversed-phase HPLC

CAS MN: 1-101-CAS-67587

Method Category: Active Pharmaceutical Ingredient and Metabolite Analysis

Technique: Reversed-phase HPLC

分析に用いた
物質に関する情報

Materials	Role	Image	CAS RN
Atorvastatin	analyte	View Structure	134523-00-5
Metoprolol	analyte	View Structure	51384-51-1
Aspirin	analyte	View Structure	50-78-2
Ramipril	analyte	View Structure	
Pharmaceutical tablets	matrix		

収録源

Source

Simultaneous estimation of aspirin, ramipril, metoprolol and atorvastatin in bulk and its polypill using HPLC technique

著者名
雑誌名

Pawar, A. K. M.; Nageswara Rao, A. B. N.; Sreekanth, K.; Palavan, C.; Gowri Sankar, D.

Journal of Pharmacy Research (2012), 5 (1), 26 - 29, 4 pp.. Journal of Pharmacy Research

CODEN: JPROFW | ISSN: 09746943

Document Sources

抄録

Abstract ^

A simple and reliable isocratic reversed-phase high-performance liquid chromatog. (RP-HPLC) method was developed and validated for the simultaneous estimation of drugs were separated on a 250mm × 4.6mm an exptl. design, was a 50:25:25 (volume/volu

使用機器

Equipment Used

RP-HPLC, 2080 model, JASCO

UV detector, 2075, JASCO

UV-Vis spectrophotometer, V-550, JASCO

条件

Conditions

Chromatographic

Mobile phase- 50:25:25 (v/v/v) mixture of acetonitrile, methanol and triethylammonium phosphate buffer (pH 2.5); flow rate- 0.8 ml/min; UV detection- 225 nm.

分析手順

Instructions

Preparation of triethylammonium phosphate buffer:

1. Prepare 0.1% orthophosphoric acid with HPLC grade water and adjust its pH to 2.5 with triethyl amine, use this solution as a buffer.

Preparation of mobile phase

1. Prepare mobile phase by mixing acetonitrile, methanol and buffer in the ratio of 50:25:25 v/v respectively.
2. Filter it through 0.45 μ Nylon membrane filter and sonicate, use this solution as diluent.

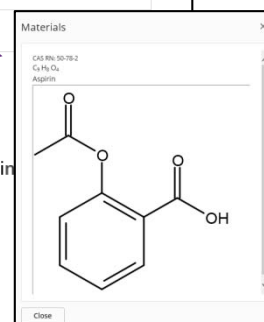
Aspirin(ASP), Metoprolol (MET), Atorvastatin (ATO) and Ramipril (RAM) sample preparation

1. Weigh twenty kits, finely powder and extract an accurately weigh sample of powder tablets equivalent to 75 mg ASP, 50 mg MET, 5 mg RAM and 10 mg ATO with small amount of diluent in a 100 ml volumetric flask.
2. Shake the solution well and allow stand for 15 min with intermittent sonication to ensure complete solubility of drug.
3. Make the contents up to the mark with the diluent and filter through a 0.45 μ membrane filter.
4. From the filtrate, make dilutions in a 10 ml volumetric flask to get 150 μg/ml ASP, 100 μg/ml MET, 10 μg/ml RAM and 20 μg/ml ATO respectively.

分析データ

Validation

Limit of Detection 3.052 μg/mL, Aspirin (ASP)
3.7 μg/mL, Metoprolol (MET)



項目ごとのわかりやすい表示

- ・ 分析手法の概要を簡単に把握できるように、項目別に情報が整理されています。
 - 分析手法の出典, 使用機器, 条件, 分析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, 調べる手間が省けます。

検索結果の比較

	1	2	3
Title タイトル	Analysis of Aspirin in Pharmaceutical capsules by Reversed-phase HPLC	Analysis of Aspirin in Pharmaceutical tablets by Reversed-phase HPLC	Analysis of Aspirin in Pharmaceutical tablets by Reversed-phase HPLC
Technique 分析手法	Reversed-phase HPLC	Reversed-phase HPLC	Reversed-phase HPLC
Analyte 分析対象	Aspirin; Clopidogrel bisulfate	Atorvastatin; Metoprolol; Aspirin; Ramipril	Aspirin; Salicylic acid
Matrix 基質	Pharmaceutical capsules	Pharmaceutical tablets	Pharmaceutical tablets
Other Materials その他物質	Membrane filter (0.45 μ); Reverse phase phenomenax C ₁₈ column (250 mm x 4.6 mm)	Injection valve; reverse phase C18 column (250 x 4.6mm I.D: particle size 5 μm)	C18 column (100 mm x 4.6 mm, 5 μm particle size)
Equipment Used 使用機器	HPLC system, class VP series, Shimadzu	RP-HPLC, 2080 model, JASCO; UV detector, 2075, JASCO; UV-Vis spectrophotometer, V-550, JASCO	LC system, Waters; HPLC system, Alliance, Waters
Conditions 条件	Chromatographic: mobile phase-a mixture of acetonitrile, methanol and 20 mM phosphate buffer (adjust to pH 3 using ortho phosphoric acid) in the ratio of 50:7:43 v/v; Flow rate-1ml/min;	Chromatographic: Mobile phase- 50:25:25 (v/v/v) mixture of acetonitrile, methanol and triethylammonium phosphate buffer (pH 2.5); flow rate- 0.8 ml/min; UV detection- 225 nm. View Less ^	Chromatographic: Flow rate - 1.5 mL/min (isocratic); column temperature - 50 C; injection volume - 20 μL; UV detection - 275 nm; Run time - 10 min. View Less ^
Accuracy 精確さ	100.17-101.33% (Recovery, 0.424% RSD) in 3.00-9.00 μg/ml spiked, Aspirin, 99.60-100.67% (Recovery, 0.387% RSD) in 3.00-9.00 μg/ml spiked, Clopidogrel bisulfate	99.923, 99.694, 99.539 (% recovery) for 600, 750, 900 μg/mL, respectively, Aspirin (ASP), 100.244, 100.293, 100.550 (% recovery) for 40, 50, 60 μg/mL, respectively,	107.1%, 25 μg/mL; 103.1%, 50 μg/mL; 102.7%, 100 μg/mL; 101.4%, 150 μg/mL; 101.1%, 200 μg/mL View Less ^
Precision 精度	0.272% (RSD), Aspirin, 0.535% (RSD), Clopidogrel bisulfate	0.03 (% RSD, intraday); 0.021	1.600% RSD

表形式で分析手法を比較

- ・興味のあるレコードを選択し、表にして各項目を比較できます。
 - 自身で情報をまとめる必要がなく、大幅に時間を短縮できます。
 - 項目別に比較できるので、分析手法の概要が一目瞭然！
 - 各レコードや比較表は、PDF または XLS 形式で保存できます。

お問い合わせ

MethodsNow に関する詳細は、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。
 化学情報協会 情報事業部 マーケティンググループ
 TEL: 0120-151-462 E-mail: support@jaici.or.jp