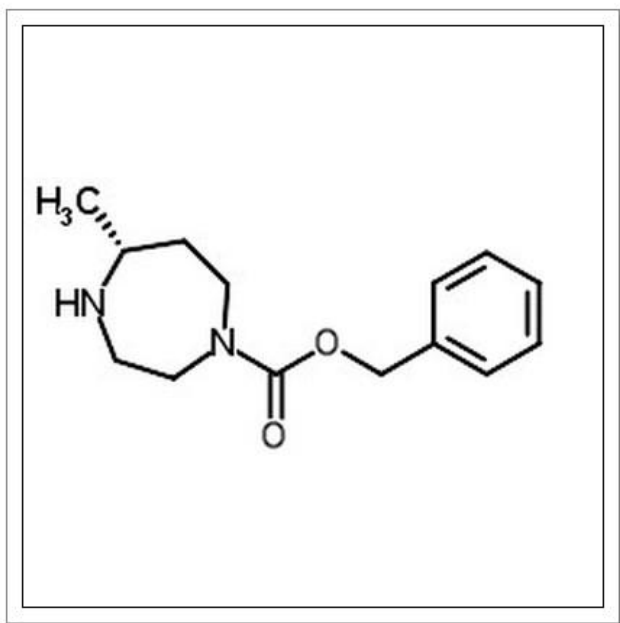


# (5R)-六氢-5-甲基-1H-1,4-二氮杂卓-1-羧酸苄酯

*(5R)-Hexahydro-5-methyl-1H-1,4-diazepine-1-carboxylic acid phenylmethyl ester*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(5R)-Hexahydro-5-methyl-1H-1,4-diazepine-1-carboxylic acid phenylmethyl ester
中文名称	(5R)-六氢-5-甲基-1H-1,4-二氮杂卓-1-羧酸苄酯
CAS 号	1001401-60-0
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	248.321
纯度	>96%

## 产品说明

### (5R)-六氢-5-甲基-1H-1,4-二氮杂卓-1-羧酸苄酯产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(5R)-Hexahydro-5-methyl-1H-1,4-diazepine-1-carboxylic acid phenylmethyl ester, 中文名称为(5R)-六氢-5-甲基-1H-1,4-二氮杂卓-1-羧酸苄酯, CAS 号为 1001401-60-0。其分子式为 C<sub>14</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 248.321, 纯度高于 96%。该化合物为手性二氮杂卓衍生物, 结构中包含苄酯基团和甲基取代的六氢二氮杂卓环, 具有特定的立体构型(5R), 在有机合成和药物化学中具有重要价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为二氮杂卓类骨架的衍生物, 可通过其刚性环结构和酯基官能团参与多种生物活性分子的合成。其手性中心(5R 构型)在药物设计中尤为关键, 可能影响与靶标蛋白的相互作用或代谢稳定性。在酶抑制或受体调节研究中, 此类结构常作为中间体或药效团修饰的基础模块。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为手性砌块用于合成神经调节剂、G 蛋白偶联受体(GPCR)配体或蛋白酶抑制剂。
- 有机合成: 用于构建含二氮杂卓环的复杂分子, 如天然产物类似物或催化剂配体。
- 生化研究: 可能用于探索二氮杂卓类化合物在细胞信号传导中的作用机制。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C 下避光干燥保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时应在惰性气氛(如氮气)下操作, 防止酯基水解或氧化。溶解推荐使用无水有机溶剂(如 DMF、DMSO 或干燥二氯甲烷)。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度>96%，批次间质量稳定。安全信息如下：

- 潜在危害：可能对眼睛、皮肤或呼吸系统有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。
- 应急处理：接触皮肤后立即用肥皂水冲洗，吸入粉尘需转移至通风处。
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排放至环境中。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需结合实验设计进一步优化条件。