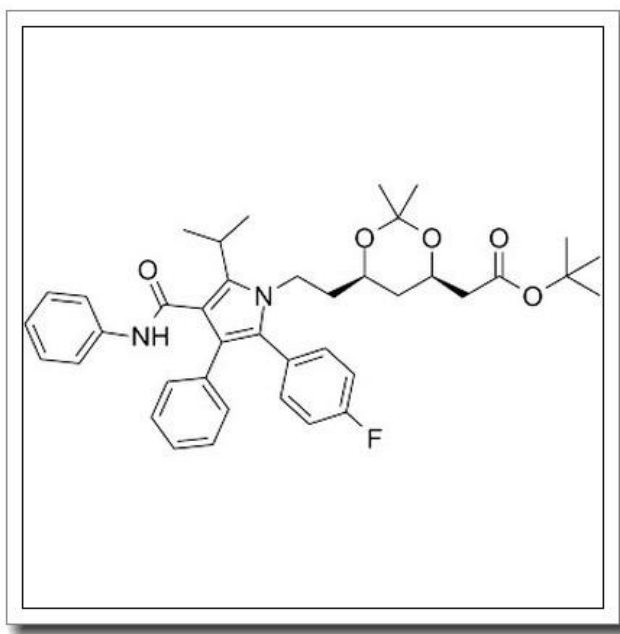


(4R-cis)-6-[2-[2-(4-氟苯基)-5-(1-异丙基)-3-苯基-4-[(苯胺)羰基]-1H-吡咯-1-基]乙基]-2,2-二甲基-1,3-二氧己环-4-乙酸叔丁酯

tert-Butyl (4R, 6R)-2-[[[6-(2-4-fluorophenyl)-5-isopropyl-3-phenyl-4-(phenylcarbamoyl)pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-dioxan-4-yl]acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl (4R, 6R)-2-[[[6-(2-4-fluorophenyl)-5-isopropyl-3-phenyl-4-(phenylcarbamoyl)pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-dioxan-4-yl]acetate</i>
中文名称	(4R-cis)-6-[2-[2-(4-氟苯基)-5-(1-异丙基)-3-苯基-4-[(苯胺)羰基]-1H-吡咯-1-基]乙基]-2,2-二甲基-1,3-二

	氧己环-4-乙酸叔丁酯
CAS 号	125971-95-1
分子式	C ₄₀ H ₄₇ N ₂ O ₅
分子量	654.81
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(4R-cis)-6-[2-[2-(4-氟苯基)-5-(1-异丙基)-3-苯基-4-[(苯胺)羰基]-1H-吡咯-1-基]乙基]-2,2-二甲基-1,3-二氧己环-4-乙酸叔丁酯，CAS 号为 125971-95-1，分子式为 C₄₀H₄₇FN₂O₅，分子量为 654.81。其结构包含吡咯环、二氧己环及苯基等特征基团，纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为一类结构复杂的吡咯衍生物，该化合物可通过抑制特定酶活性（如胆固醇合成途径中的限速酶）参与生物调控。其苯基和氟苯基结构赋予其良好的靶向性，而叔丁酯基团则增强其细胞膜穿透能力，在药物研发中常用于先导化合物的结构优化或作为生物活性分子探针。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域，具体包括：1) 作为 HMG-CoA 还原酶抑制剂类药物的中间体，用于降血脂药物的合成；2) 在激酶或 GPCR 靶点研究中作为工具化合物；3) 用于结构-活性关系 (SAR) 研究，以优化药物分子的亲脂性和代谢稳定性。实验室使用时需配合体外细胞实验或动物模型验证其活性。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照和湿度影响。开封后需充氮保护以延长稳定性。使用前需恢复至室温并短暂离心，推荐工作浓度为 0.1-10 μM（需根据实验体系调整）。溶解时优先选用 DMSO 配制母液，后续用缓冲液稀释至目标浓度，注意控制 DMSO 终浓度 ≤0.1%。

5. 质量控制与安全信息

本品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 确证结构，HPLC 检测显示单一主峰。操作时需穿戴防护装备（手套、护目镜及实验服），避免吸入或皮肤接触。如意外接触，

立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品规范处置。安全数据表（SDS）可随货提供，详细毒理学数据参见第 11 节。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。具体实验方案需结合文献及预实验结果设计。