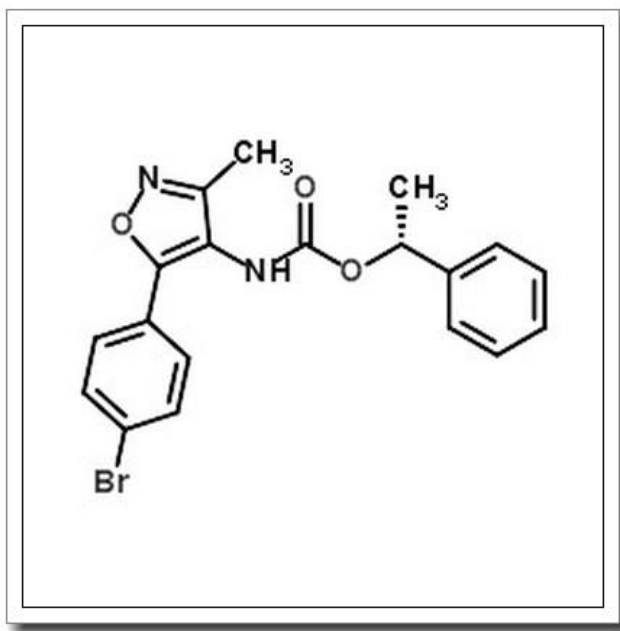


[5-(4-溴苯基)-3-甲基异恶唑-4-基]氨基甲酸 (R)-1-苯基乙基酯

(1R)-1-Phenylethyl [5-(4-bromophenyl)-3-methyl-1,2-oxazol-4-yl]carbamate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | (1R)-1-Phenylethyl [5-(4-bromophenyl)-3-methyl-1,2-oxazol-4-yl]carbamate |
| 中文名称 | [5-(4-溴苯基)-3-甲基异恶唑-4-基]氨基甲酸 (R)-1-苯基乙基酯 |
| CAS 号 | 1228690-37-6 |
| 分子式 | C ₁₉ H ₁₇ BrN ₂ O ₃ |
| 分子量 | 401.254 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(1R)-1-Phenylethyl [5-(4-bromophenyl)-3-methyl-1,2-oxazol-4-yl]carbamate, 中文名称为[5-(4-溴苯基)-3-甲基异恶唑-4-基]氨基甲酸 (R)-1-苯基乙基酯, CAS 号为 1228690-37-6。其分子式为 C₁₉H₁₇BrN₂O₃, 分子量为 401.254, 纯度高于 96%。该化合物是一种手性杂环衍生物, 结构中含有溴苯基、甲基异恶唑和氨基甲酸酯基团, 具有明确的立体构型 (R 构型), 在有机合成和药物研发中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子抑制剂或中间体, 可通过其异恶唑环和氨基甲酸酯结构参与多种生物化学反应。其溴苯基团增强了分子的疏水性, 而手性中心可能赋予其特异性靶向能力, 在酶抑制或受体调节中发挥作用。此类结构常见于抗炎、抗肿瘤或神经保护剂的研究中, 是探索构效关系的重要工具分子。

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, 可作为激酶抑制剂或信号通路调节剂的候选化合物。具体用途包括: 1) 作为先导化合物用于新药筛选; 2) 用于手性药物合成中的关键中间体; 3) 在化学生物学研究中作为探针分子, 研究蛋白质-小分子相互作用机制。此外, 其高纯度特性也适用于分析标准品或对照品的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 条件下避光保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氩气) 环境中。开封后应避免反复冻融, 建议分装使用。使用时需在干燥惰性氛围 (如氮气手套箱) 中操作, 溶解推荐使用无水 DMSO 或二氯甲烷等有机溶剂。工作浓度需根据实验体系优化, 避免高温或强酸强碱条件导致结构降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 >96%, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 确认结构。安全信息提示: 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时需佩戴防护手套、

护目镜及防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废物处理，遵守当地环保法规。详细安全数据可参考随附的MSDS（材料安全数据表）。