

Carbamic acid, [(1R)-1-(3-bromophenyl)-2-hydroxyethyl]-, 1,1-dimethylethyl ester (9CI)

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Carbamic acid, [(1R)-1-(3-bromophenyl)-2-hydroxyethyl]-, 1,1-dimethylethyl ester (9CI)
产品目录号	
CAS 号	380610-92-4
分子式	C ₁₃ H ₁₈ BrN ₀₃
分子量	316.19092
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 Carbamic acid, [(1R)-1-(3-bromophenyl)-2-hydroxyethyl]-, 1,1-dimethylethyl ester (9CI), 化学式 C₁₃H₁₈BrN₀₃, 分子量 316.19, CAS 号 380610-92-4。外观为白色至类白色结晶或粉末, 纯度>96%。该化合物属于氨基甲酸酯类衍生物, 具有手性中心 (R 构型) 和溴代苯基结构, 其叔丁酯基团赋予其良好的稳定性。易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该分子结构中的溴苯基团可作为亲电反应位点, 参与偶联反应; 羟基和氨基甲酸酯基团使其成为蛋白酶抑制剂或受体调节剂的潜在中间体。其手性特性在不对称合成和药物研发中具有重要意义, 尤其适用于神经科学、肿瘤靶向治疗等领域的高选择性化合物开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域:

- 作为小分子抑制剂的关键合成砌块, 用于激酶或 G 蛋白偶联受体研究
- 用于构建 β-氨基醇类化合物, 应用于抗抑郁或抗炎药物开发
- 在放射性标记前体合成中发挥重要作用
- 作为手性配体或催化剂组分参与不对称合成

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体 (如氩气) 保护下, 避光防潮。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥环境下操作, 推荐使用手套箱或氮气保护。溶解建议先用 DMSO 配制成母液, 再稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 确保纯度>96%。本品对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴护目镜和防化手套。MSDS 数据显示其急性毒性为 LD₅₀>500

mg/kg（大鼠口服），属于有害化学品。废弃物处理需符合当地有机卤化物处置规范，禁止直接排入下水道。

（注：实际应用前请查阅最新文献确认具体反应条件，所有操作应在通风橱中进行。）