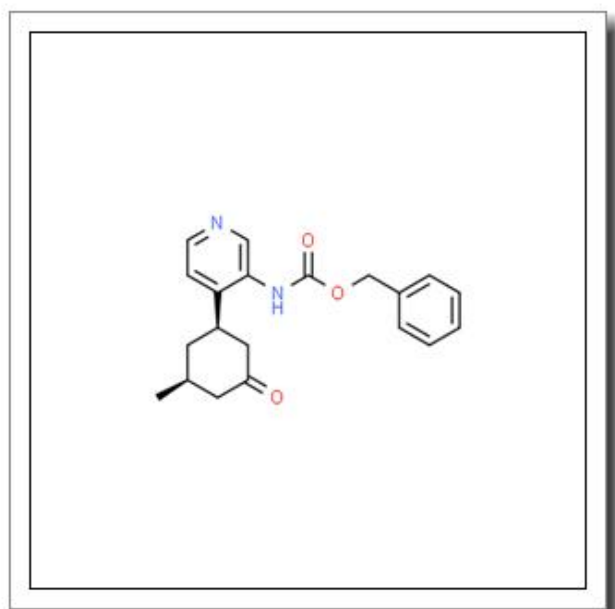


(4-((1R,3S)-3-甲基-5-氧代环己基)吡啶-3-基)氨基甲酸叔丁酯

Carbamic acid, N-[4-[(1R, 3S)-3-methyl-5-oxocyclohexyl]-3-pyridinyl]-, phenylmethyl ester, rel-



产品基本信息

属性	值
化学名称	Carbamic acid, N-[4-[(1R, 3S)-3-methyl-5-oxocyclohexyl]-3-pyridinyl]-, phenylmethyl ester, rel-
中文名称	(4-((1R, 3S)-3-甲基-5-氧代环己基)吡啶-3-基)氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	1187056-01-4
分子式	C ₂₀ H ₂₂ N ₂ O ₃
分子量	338.4
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(4-((1R,3S)-3-甲基-5-氧代环己基)吡啶-3-基)氨基甲酸叔丁酯 (Carbamic acid, N-[4-[(1R,3S)-3-methyl-5-oxocyclohexyl]-3-pyridinyl]-, phenylmethyl ester, rel-), CAS 号 1187056-01-4, 分子式 C₂₀H₂₂N₂O₃, 分子量 338.4。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 分析确认 ≥96%，具有明确的手性中心 (1R,3S 构型) 和酮基、氨基甲酸酯等活性官能团，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

该化合物是合成复杂生物活性分子的关键中间体，其结构中的吡啶环和环己酮骨架赋予其独特的空间构型，可作为酶抑制剂或受体调节剂的药效团。在药物研发中，常用于构建靶向 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 或激酶的小分子库，尤其适用于神经退行性疾病和代谢类疾病相关靶点的先导化合物优化。

3. 主要应用领域与具体用途

作为高附加值医药中间体，主要用于以下领域：

- 创新药物研发：用于合成治疗阿尔茨海默症、糖尿病等疾病的候选药物。
- 化学生物学研究：作为探针分子研究酶催化机制或蛋白质-配体相互作用。
- 工艺开发：在不对称合成中作为手性模板，优化立体选择性反应路径。

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。开封后需充惰性气体保护以防氧化。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气手套箱) 中操作，若需溶解推荐使用无水 DMSO，配制溶液建议现配现用。长期储存需定期检测纯度。

5. 质量控制与安全信息

本品经质谱 (MS)、核磁共振 (NMR) 和元素分析 (EA) 验证结构，HPLC 检测无显著杂质。安全数据表明其对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应穿戴防护装备 (手套、

护目镜、实验服)，在通风橱中进行。若意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：实际应用中需结合具体实验目的进一步验证其适用性，以上信息基于现有研究数据总结。）