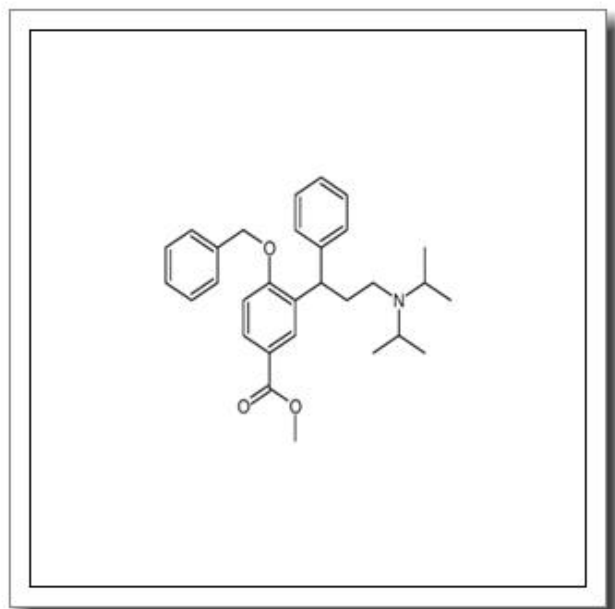


4-(苄氧基)-3-(3-(二异丙基氨基)-1-苯基丙基)苯甲酸甲酯

Methyl 4-(benzyloxy)-3-[3-(diisopropylamino)-1-phenylpropyl]benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-(benzyloxy)-3-[3-(diisopropylamino)-1-phenylpropyl]benzoate
中文名称	4-(苄氧基)-3-(3-(二异丙基氨基)-1-苯基丙基)苯甲酸甲酯
CAS 号	286930-05-0
分子式	C30H37NO3
分子量	459.62
纯度	≥96%

产品说明

4-(苄氧基)-3-(3-(二异丙基氨基)-1-苯基丙基)苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 Methyl 4-(benzyloxy)-3-[3-(diisopropylamino)-1-phenylpropyl]benzoate，CAS 号为 286930-05-0，分子式 C₃₀H₃₇N₃O₃，分子量 459.62。其结构中包含苯甲酸甲酯骨架、苄氧基保护基团以及二异丙氨基侧链，赋予其独特的空间位阻和亲脂性。纯度 ≥96% (HPLC)，溶解性测试显示易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和氯仿，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的有机合成中间体，其分子中的二异丙氨基和苯基结构使其在药物化学中具有特殊价值。可作为 β-氨基醇类衍生物的前体，参与手性催化反应或作为受体配体。在神经递质类似物合成中，其刚性结构有助于模拟天然生物碱的活性构象。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：一是作为抗组胺药物或中枢神经系统调节剂的合成砌块；二是在不对称催化反应中作为手性助剂；三是用于构建具有生物活性的复杂杂环体系。实验室级产品适用于先导化合物优化和结构-活性关系 (SAR) 研究。

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，长期储存建议分装。使用前需恢复至室温并充分干燥，称量应在干燥环境下进行。推荐工作浓度为 1-10 mM (DMSO 配制)，溶液需现配现用，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质检，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >500 mg/kg，操作时需佩戴防护手套和护目镜。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。具体应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。