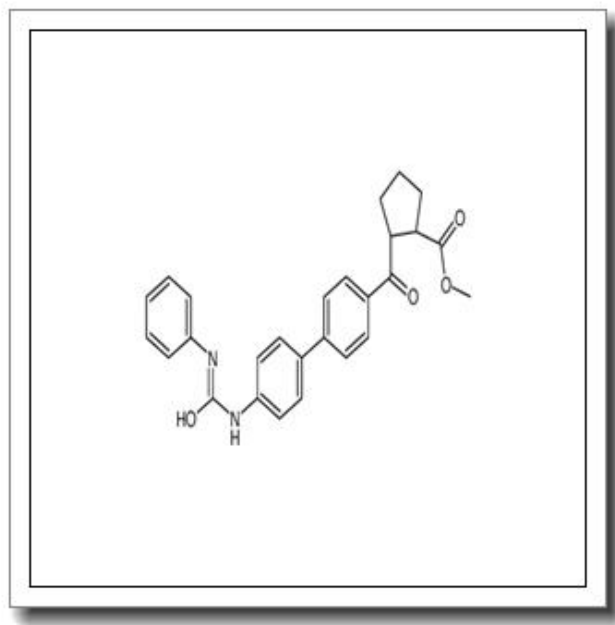


Methyl (1R,2R)-2-({4'- [(phenylcarbamoyl)amino]-4- biphenyl})carbo nyl)cyclopentanecarboxylate

*Methyl (1R, 2R)-2-({4' - [(phenylcarbamoyl) amino]-4-biphenyl}) carbo
nyl)cyclopentanecarboxylate*



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl (1R, 2R)-2-({4' - [(phenylcarbamoyl) amino]-4-biphenyl}) carbo nyl)cyclopentanecarboxylate
中文名称	Methyl (1R, 2R)-2-({4' - [(phenylcarbamoyl) amino]-4-biphenyl}) carbo nyl)cyclopentanecarboxylate
CAS 号	959122-10-2

分子式	C ₂₇ H ₂₆ N ₂ O ₄
分子量	442. 506
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 Methyl (1R, 2R)-2-({4'-[(phenylcarbamoyl)amino]-4-biphenyl}carbonyl)cyclopentanecarboxylate, 化学式 C₂₇H₂₆N₂O₄, 分子量 442.506, CAS 号 959122-10-2。该化合物是一种高纯度 (≥96%) 的手性有机小分子, 结构中包含环戊烷羧酸甲酯骨架与联苯脲基团, 具有明确的立体构型 (1R, 2R)。其独特的分子设计使其在生物化学领域表现出特异性结合能力。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过脲基与羧酸酯基团的协同作用, 可作为靶向蛋白的变构调节剂或酶抑制剂。其联苯结构域能有效结合疏水口袋, 而手性中心则赋予分子立体选择性, 在药物研发中常用于先导化合物优化或作用机制研究, 尤其在 GPCR (G 蛋白偶联受体) 相关通路中具有潜在调控价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域:

- (1) 作为激酶抑制剂候选分子, 用于抗肿瘤药物筛选
- (2) 构建手性探针, 研究蛋白质-配体相互作用机制
- (3) 用于炎症信号通路 (如 NF-κB) 的分子阻断实验
- (4) 在有机合成中作为手性模板构建复杂杂环体系

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避免光照与湿度。使用时需平衡至室温后开封, 建议在干燥氮气环境下分装。溶解性测试表明其易溶于 DMSO (≥50 mg/mL), 甲醇中溶解度约为 10 mg/mL, 水溶液中需加入共溶剂。工作液建议现配现用, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (UV 254 nm) 检测纯度 ≥96%, 手性 HPLC 确认 ee 值 >99%。核磁共振 (1H/13C NMR) 与质谱 (HRMS) 验证结构一致性。

安全警示：本品可能引起眼睛/皮肤刺激，操作时需佩戴护目镜与丁腈手套。CMR类别尚未完全评估，建议在通风橱中处理。废弃物应作为有机有害物质处置，遵守当地法规。

（注：实际应用前请查阅最新文献确认具体生物活性数据，本说明基于现有理化参数编制）