(19)国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 114555627 A
(43)申请公布日 2022.05.27

(21)申请号 202080073596.1

(22)申请日 2020.10.29

(30)优先权数据
62/927,739 2019.10.30 US
62/930,654 2019.11.05 US
62/931,995 2019.11.07 US

(85)PCT国际申请进入国家阶段日
2022.04.20

(86)PCT国际申请的申请数据
PCT/US2020/057875 2020.10.29

(87)PCT国际申请的公布数据
WO2021/087056 EN 2021.05.06

(71)申请人 百时美施贵宝公司
地址 美国新泽西州

(72)发明人 汪涛 P·M·斯科拉 张钟兴

(74)专利代理机构 北京坤瑞律师事务所 11494
专利代理师 封新琴

(51)Int.Cl.
*C07K 7/08*(2006.01)
*A61K 38/10*(2006.01)
*A61P 37/04*(2006.01)
*A61P 35/00*(2006.01)
*A61P 31/12*(2006.01)

权利要求书2页 说明书238页

(54)发明名称

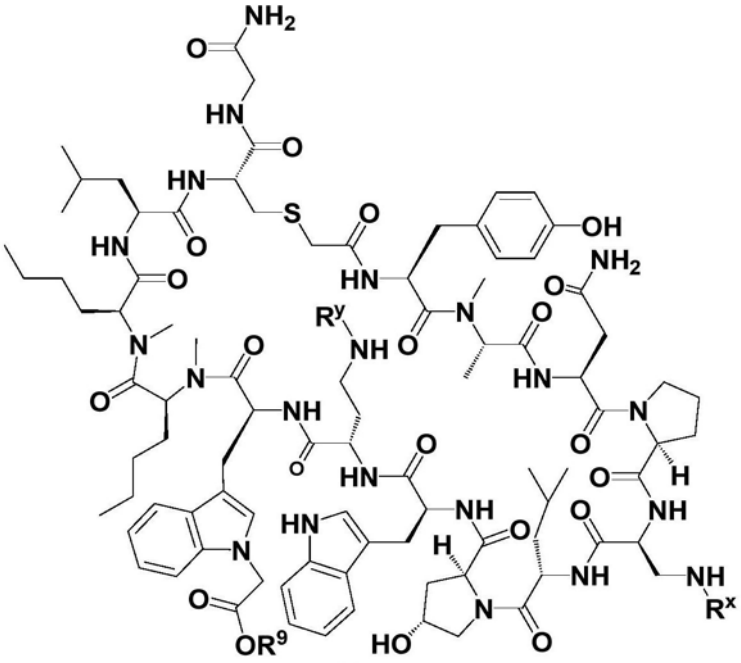
免疫调节剂

(57)摘要

根据本公开文本,已经发现与PD-L1结合并且能够抑制PD-L1与PD-1和CD80的相互作用的大环化合物。这些大环化合物展现出体外免疫调节功效,从而使它们成为治疗包括癌症和感染性疾病在内的各种疾病的治疗候选物。

CN 114555627 A

1.一种式(I)的化合物



(I),

或其药学上可接受的盐,其中:

$R^x$和$R^y$独立地选自H、-(C=O)$R^1$、-(C=$NR^2$)$R^3$、-(C=O)$OR^4$、-(C=O)$NR^5R^6$和-(C=S)$NR^7R^8$,前提是$R^x$和$R^y$中的至少一个不是H;

每个$R^1$选自苯基、双环碳环基团、三环碳环基团、单环杂环基、双环杂环基和三环杂环基,其中$R^1$被0-4个$R^{1a}$基团取代,前提是$R^1$不是呋喃基;

每个$R^{1a}$独立地选自卤素、-$NO_2$、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、-O-$C_1$-$C_{10}$烷基、-$CO_2C_1$-$C_3$烷基、-$CO_2$H、-C(NH)NH苯基、-$OCH_2$苯基、苯基、-O-苯基和单环杂环基,其中所述-O-$C_1$-$C_{10}$烷基、苯基和单环杂环基被0-2个$R^{1b}$基团取代;

每个$R^{1b}$独立地选自-CN、卤素、-$OC_1$-$C_3$烷基、-$C_1$-$C_3$烷基和苯基;

$R^2$是H或苯基;

$R^3$是苯基;

$R^4$选自苯基、双环碳环基团、三环碳环基团、单环杂环基、双环杂环基和三环杂环基,其中$R^4$被0-4个$R^{4a}$基团取代,被0-4个$R^{4a}$取代;

每个$R^{4a}$独立地选自卤素、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基和-$OC_1$-$C_{10}$烷基;

$R^5$选自H、$C_1$-$C_3$烷基和苯基;

$R^6$选自苯基、双环碳环基团、三环碳环基团、单环杂环基、双环杂环基和三环杂环基,其中$R^4$被0-4个$R^{6a}$基团取代;

每个$R^{6a}$独立地选自卤素、-$NO_2$、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、-O-$C_1$-$C_{10}$烷基、-$CO_2C_1$-$C_3$烷基、-$CO_2$H、-C(NH)NH苯基、-$OCH_2$苯基、苯基、-O-苯基和单环杂环基,其中所述苯基和所述单环杂环基被0-2个$R^{6b}$基团取代;

每个$R^{6b}$独立地选自-CN、卤素、-$OC_1$-$C_3$烷基、$C_1$-$C_3$烷基和苯基;

$R^7$选自H、$C_1$-$C_3$烷基和苯基;

$R^8$选自苯基、双环碳环基团、三环碳环基团、单环杂环基、双环杂环基团和三环杂环基

团，其中$R^8$被0-4个$R^{8a}$取代；

每个$R^{8a}$独立地选自卤素、$NO_2$、-CN、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、$C_3$-$C_6$环烷基、-O-$C_1$-$C_{10}$烷基、-C(=O)$NH_2$、O-卤代$C_1$-$C_{10}$烷基、-NHCO$_2$$C_1$-$C_{10}$烷基、-$CO_2C_1$-$C_6$烷基、O-苯基、苯基和单环杂环基，其中所述杂环基被0-2个$R^{8b}$基团取代；

每个$R^{8b}$独立地是卤素或$C_1$-$C_3$烷基；并且

$R^9$是H或$C_1$-$C_3$烷基。

2.根据权利要求1所述的化合物或其药学上可接受的盐，其中$R^x$是H。

3.根据权利要求1所述的化合物或其药学上可接受的盐，其中$R^y$是H。

4.根据权利要求1所述的化合物或其药学上可接受的盐，其中$R^x$和$R^y$各自不是H。

5.根据权利要求1所述的化合物或其药学上可接受的盐，其中$R^9$是H或-$CH_3$。

6.一种药物组合物，其包含根据权利要求1至5中任一项所述的化合物或其药学上可接受的盐和药学上可接受的载体。

7.一种增强、刺激和/或增加有需要的受试者的免疫应答的方法，所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的根据权利要求1至5中任一项所述的化合物或其治疗上可接受的盐。

8.一种抑制有需要的受试者的癌细胞的生长、增殖或转移的方法，所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的根据权利要求1至5中任一项所述的化合物或其治疗上可接受的盐。

9.根据权利要求8所述的方法，其中所述癌症选自黑色素瘤、肾细胞癌、鳞状非小细胞肺癌(NSCLC)、非鳞状NSCLC、结直肠癌、去势抵抗性前列腺癌、卵巢癌、胃癌、肝细胞癌、胰腺癌、头颈部鳞状细胞癌、食道癌、胃肠道癌和乳腺癌以及血液恶性肿瘤。

10.一种治疗有需要的受试者的感染性疾病的方法，所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的根据权利要求1至4中任一项所述的化合物或其治疗上可接受的盐。

11.根据权利要求9所述的方法，其中所述感染性疾病由病毒引起。

12.一种治疗有需要的受试者的脓毒性休克的方法，所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的根据权利要求1至4中任一项所述的化合物或其治疗上可接受的盐。

13.一种阻断受试者的PD-L1与PD-1和/或CD80的相互作用的方法，所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的根据权利要求1至5中任一项所述的化合物或其治疗上可接受的盐。

# 免疫调节剂

相关申请的交叉引用

[0001] 本申请要求2019年10月30日提交的美国临时申请号62/927,739、2019年11月5日提交的美国临时申请号62/930,654、和2019年11月7日提交的美国临时申请62/931,995的优先权权益,将这些申请全部通过引用以其整体并入本文。

## 技术领域

[0002] 本公开文本提供了结合PD-L1并且能够抑制PD-L1与PD-1和CD80相互作用的大环化合物。这些大环化合物展现出体外免疫调节功效,从而使它们成为治疗包括癌症和感染性疾病在内的各种疾病的治疗候选物。

## 背景技术

[0003] 程序性死亡蛋白1(PD-1)是CD28受体家族的抑制性成员,所述受体家族还包括CD28、CTLA-4、ICOS和BTLA。PD-1表达于激活的B细胞、T细胞和髓样细胞上。

[0004] PD-1蛋白是55kDa的I型跨膜蛋白,其是Ig基因超家族的一部分。PD-1含有膜近端免疫受体酪氨酸抑制基序(ITIM)和膜远端酪氨酸转变基序。虽然PD-1在结构上与CTLA-4类似,但它缺少MYPPY基序,所述基序对于CD80 CD86(B7-2)结合至关重要。已经鉴定出PD-1的两个配体,PD-L1(B7-H1)和PD-L2(b7-DC)。已显示在与表达PD-L1或PD-L2的细胞相互作用后,表达PD-1的T细胞的激活下调。PD-L1和PD-L2二者均是与PD-1结合但是不与其他CD28家族成员结合的B7蛋白家族成员。PD-L1配体在各种人类癌症中是丰富的。PD-1与PD-L1之间的相互作用导致肿瘤浸润淋巴细胞的减少、T细胞受体介导的增殖的减少、以及癌性细胞的免疫逃逸。免疫抑制可以通过抑制PD-1与PD-L1的局部相互作用逆转,并且该效应当PD-1与PD-L2的相互作用也被阻断时是加和性的。

[0005] 还显示PD-L1与CD80相互作用。已经显示表达免疫细胞上PD-L1/CD80的相互作用是一种抑制性相互作用。显示此相互作用的阻断消除了此抑制性相互作用。

[0006] 当表达PD-1的T细胞接触表达其配体的细胞时,响应于抗原刺激的功能活性(包括增殖、细胞因子分泌和细胞毒性)降低。PD-1/PD-L1或PD-L2相互作用在感染或肿瘤的消退过程中或自我形成过程中下调免疫应答。慢性抗原刺激(诸如在肿瘤疾病或慢性感染期间发生的慢性抗原刺激)产生这样的T细胞,其表达升高水平的PD-1并且在对慢性抗原的活性方面是功能失调的。这称为“T细胞耗竭”。B细胞也展现出PD-1/PD配体抑制和“耗竭”。

[0007] 已经显示使用针对PD-L1的抗体阻断PD-1/PD-L1连接在许多系统中恢复和增强T细胞激活。患有晚期癌症的患者受益于用针对PD-L1的单克隆抗体的疗法。肿瘤和慢性感染的临床前动物模型已经显示,单克隆抗体对PD-1/PD-L1途径的阻断可以增强免疫应答并导致肿瘤排斥或感染的控制。经由PD-1/PD-L1阻断的抗肿瘤免疫疗法可以加强对多种组织学上不同的肿瘤的治疗免疫应答。

[0008] 在患有慢性感染的系统中,对PD-1/PD-L1相互作用的干扰导致T细胞活性增强。在感染了慢性淋巴细胞性脉络丛脑膜炎病毒的小鼠中,PD-L1的阻断导致改善的病毒清除和

恢复的免疫力。感染HIV-1的人源化小鼠显示出针对病毒血症和CD4+T细胞的病毒性耗尽的增强的保护作用。通过针对PD-L1的单克隆抗体阻断PD-1/PD-L1可以使来自HIV患者的T细胞恢复体外抗原特异性功能。

[0009] 阻断PD-L1/CD80相互作用还显示可刺激免疫力。由阻断PD-L1/CD80相互作用所产生的免疫刺激已经显示通过与阻断进一步的PD-1/PD-L1或PD-1/PD-L2相互作用组合而增强。

[0010] 假设免疫细胞表型的改变是脓毒性休克的重要因素。这些包括升高的PD-1和PD-L1水平。来自具有升高水平的PD-1和PD-L1的脓毒性休克患者的细胞展现出升高水平的T细胞凋亡。针对PD-L1的抗体可以降低免疫细胞凋亡的水平。此外,与野生型小鼠相比,缺乏PD-1表达的小鼠对脓毒性休克症状更具抵抗力。研究已经揭示,使用抗体阻断PD-L1的相互作用可以抑制不适当的免疫应答并且改善疾病体征。

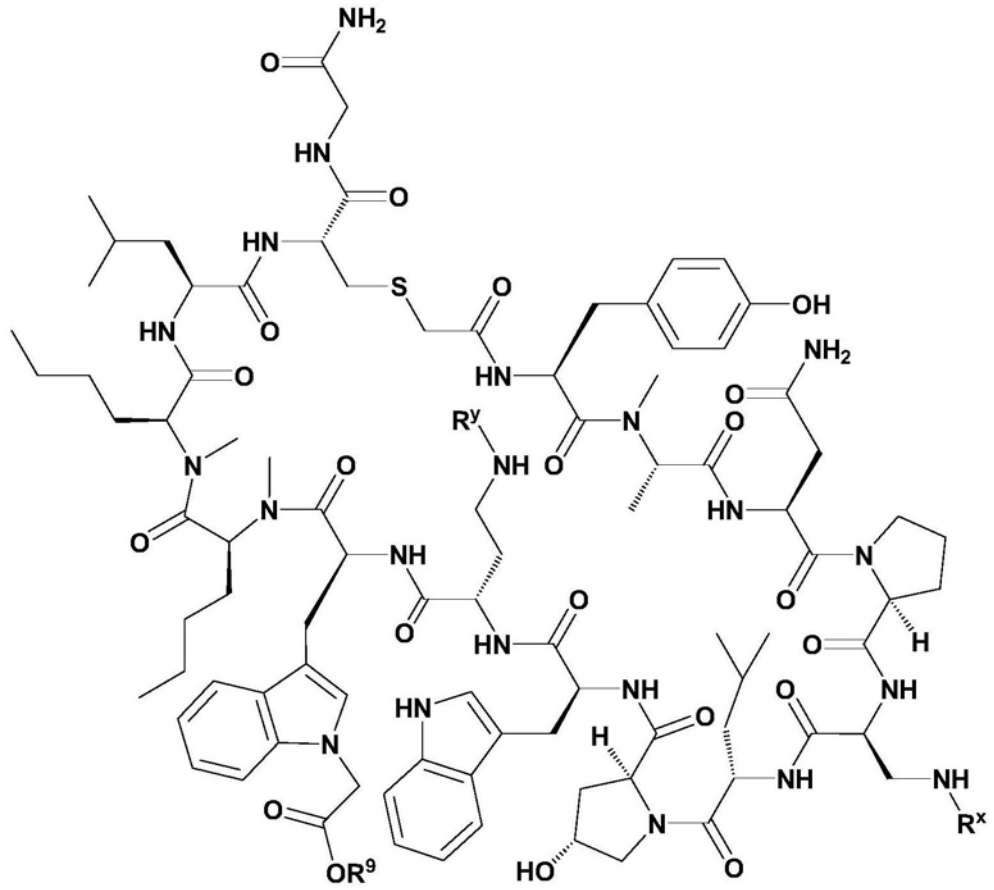
[0011] 除了增强对慢性抗原的免疫应答外,阻断PD-1/PD-L1途径还显示增强对疫苗接种(包括在慢性感染的背景下治疗性疫苗接种)的应答。

[0012] PD-1途径是源自慢性感染和肿瘤疾病期间的慢性抗原刺激的T细胞耗竭中的关键抑制性分子。已经显示通过靶向PD-L1蛋白阻断PD-1/PD-L1相互作用在体外和体内恢复抗原特异性T细胞免疫功能,包括在肿瘤或慢性感染环境中针对疫苗接种的增强的应答。因此,需要阻断PD-L1与PD-1或CD80相互作用的药剂。

## 发明内容

[0013] 本公开文本提供了大环化合物,所述大环化合物抑制PD-1/PD-L1和CD80/PD-L1蛋白/蛋白相互作用,并且因此可用于改善各种疾病,包括癌症和感染性疾病。

[0014] 在第一方面,本公开文本提供了一种式(I)的化合物



(I),

或其药学上可接受的盐，其中：

$R^x$和$R^y$独立地选自H、-(C=O)$R^1$、-(C=$NR^2$)$R^3$、-(C=O)$OR^4$、-(C=O)$NR^5R^6$和-(C=S)$NR^7R^8$，前提是$R^x$和$R^y$中的至少一个不是H；

$R^1$选自苯基、双环碳环基团、三环碳环基团、单环杂环基、双环杂环基和三环杂环基，其中$R^1$被0-4个$R^{1a}$基团取代，前提是$R^1$不是呋喃基；

每个$R^{1a}$独立地选自卤素、-$NO_2$、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、-O-$C_1$-$C_{10}$烷基、-$CO_2C_1$-$C_3$烷基、-$CO_2$H、-C(NH)NH苯基、-$OCH_2$苯基、苯基、-O-苯基和单环杂环基，其中所述-O-$C_1$-$C_{10}$烷基、苯基和单环杂环基被0-2个$R^{1b}$基团取代；

每个$R^{1b}$独立地选自-CN、卤素、-$OC_1$-$C_3$烷基、-$C_1$-$C_3$烷基和苯基；

$R^2$是H或苯基；

$R^3$是苯基；

$R^4$选自苯基、双环碳环基团、三环碳环基团、单环杂环基、双环杂环基和三环杂环基，其中$R^4$被0-4个$R^{4a}$基团取代，被0-4个$R^{4a}$取代；

每个$R^{4a}$独立地选自卤素、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基和-$OC_1$-$C_{10}$烷基；

$R^5$选自H、$C_1$-$C_3$烷基和苯基；

$R^6$选自苯基、双环碳环基团、三环碳环基团、单环杂环基、双环杂环基和三环杂环基，其中$R^4$被0-4个$R^{6a}$基团取代；

每个$R^{6a}$独立地选自卤素、-$NO_2$、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、-O-$C_1$-$C_{10}$烷基、-$CO_2C_1$-$C_3$烷基、-$CO_2$H、-C(NH)NH苯基、-$OCH_2$苯基、苯基、-O-苯基和单环杂环基，其中所述苯基和所

述单环杂环基被0-2个$R^{6b}$基团取代；

每个$R^{6b}$独立地选自-CN、卤素、-O$C_1$-$C_3$烷基、$C_1$-$C_3$烷基和苯基；

$R^7$选自H、$C_1$-$C_3$烷基和苯基；

$R^8$选自苯基、双环碳环基团、三环碳环基团、单环杂环基、双环杂环基团和三环杂环基团，其中$R^8$被0-4个$R^{8a}$取代；

每个$R^{8a}$独立地选自卤素、$NO_2$、-CN、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、$C_3$-$C_6$环烷基、-O-$C_1$-$C_{10}$烷基、-C(=O)$NH_2$、O-卤代$C_1$-$C_{10}$烷基、-NHC$O_2$$C_1$-$C_{10}$烷基、-C$O_2$$C_1$-$C_6$烷基、O-苯基、苯基和单环杂环基，其中所述杂环基被0-2个$R^{8b}$基团取代；

每个$R^{8b}$独立地是卤素或$C_1$-$C_3$烷基；并且

$R^9$是H或$C_1$-$C_3$烷基。

[0015] 在第一方面的第一实施方案中，$R^x$是H。

[0016] 在第一方面的第二实施方案中，$R^y$是H。

[0017] 在第一方面的第三实施方案中，$R^x$和$R^y$各自不是H。

[0018] 在第一方面的第四实施方案中，$R^9$是H或-$CH_3$。

[0019] 在某些实施方案中，$R^1$是苯基。在一些方面，$R^1$是双环碳环基团。在一些方面，$R^1$是三环碳环基团。在一些方面，$R^1$是单环杂环基。在一些方面，$R^1$是双环杂环基。在一些方面，$R^1$是三环杂环基。

[0020] 在某些实施方案中，$R^4$是苯基。在一些方面，$R^4$是双环碳环基团。在一些方面，$R^4$是三环碳环基团。在一些方面，$R^4$是单环杂环基。在一些方面，$R^4$是双环杂环基。在一些方面，$R^4$是三环杂环基。

[0021] 在某些实施方案中，$R^6$是苯基。在一些方面，$R^6$是双环碳环基团。在一些方面，$R^6$是三环碳环基团。在一些方面，$R^6$是单环杂环基。在一些方面，$R^6$是双环杂环基。在一些方面，$R^6$是三环杂环基。

[0022] 在某些实施方案中，$R^8$是苯基。在一些方面，$R^8$是双环碳环基团。在一些方面，$R^8$是三环碳环基团。在一些方面，$R^8$是单环杂环基。在一些方面，$R^8$是双环杂环基。在一些方面，$R^8$是三环杂环基。

[0023] 在另一个实施方案中，本公开文本提供了一种式(I)的化合物或其药学上可接受的盐，其中：

$R^x$和$R^y$独立地选自H、(C=O)$R^1$、(C=N$R^2$)$R^3$、(C=O)O$R^4$、(C=O)N$R^5$$R^6$和(C=S)N$R^7$$R^8$，前提是$R^x$和$R^y$中的至少一个不是H；

$R^1$是被1-4个$R^a$取代的芳基，或含有一个、两个或三个独立地选自-O-、-N-和-S-的杂原子的单环杂环基，其中所述单环杂环基被0-4个$R^{1a}$取代；前提是所述单环杂环基不是呋喃基；

每个$R^{1a}$是卤素、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、O-$C_1$-$C_3$烷基、O$CH_2$芳基、芳基，或含有一个、两个或三个选自-O-、-N-和-S-的杂原子的单环杂环基，其中所述O-$C_1$-$C_3$烷基、芳基和杂环基被0-2个$R^{1b}$取代；

每个$R^{1b}$是卤素、O$C_1$-$C_3$烷基、$C_1$-$C_3$烷基或芳基；

$R^2$是H或芳基；

$R^3$是芳基；

$R^4$是芳基；

$R^5$是H或芳基；

$R^6$是芳基或含有一个、两个或三个选自-O-、-N-和-S-的杂原子的单环杂环基，其中所述芳基和所述单环杂环基被0-4个$R^{6a}$取代；

每个$R^{6a}$独立地是卤素、$NO_2$、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、O-$C_1$-$C_{10}$烷基、$CO_2C_1$-$C_3$烷基、-C(NH)NH芳基、芳基、O-芳基，或含有一个、两个或三个选自-O-、-N-和-S-的杂原子的单环杂环基，其中所述芳基和所述单环杂环基被0-2个$R^{6b}$取代；

每个$R^{6b}$独立地是氰基、卤素或$C_1$-$C_3$烷基；

$R^7$是H或芳基；

$R^8$是芳基或含有一个、两个或三个独立地选自-O-、-N-和-S-的杂原子的单环杂环基，其中所述芳基和所述单环杂环基被0-4个$R^{8a}$取代；

每个$R^{8a}$独立地是卤素、$NO_2$、$C_1$-$C_3$烷基、卤代$C_1$-$C_3$烷基、O-$C_1$-$C_{10}$烷基、O-卤代$C_1$-$C_{10}$烷基、-$NHCO_2C_1$-$C_{10}$烷基、$CO_2C_1$-$C_6$烷基、O-芳基、芳基，或含有一个、两个或三个选自-O-、-N-和-S-的杂原子的单环杂环基，其中所述杂环基被0-2个$R^{8b}$取代；

每个$R^{8b}$独立地是卤素或$C_1$-$C_3$烷基；并且

$R^9$是H或$C_1$-$C_3$烷基。

[0024] 在另一个实施方案中，本公开文本提供了选自第一方面的范围内例示的例子的化合物，或其药学上可接受的盐、互变异构体或立体异构体。

[0025] 在另一个实施方案中，提供了一种选自第一方面的范围内的化合物的任何子集列表的化合物。

[0026] 在第二方面，本公开文本提供了一种增强、刺激和/或增加有需要的受试者的免疫应答的方法，其中所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的式(I)的化合物或其药学上可接受的盐。

[0027] 在第三方面，本公开文本提供了一种阻断受试者的PD-L1与PD-1和/或CD80相互作用的方法，其中所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的式(I)的化合物或其药学上可接受的盐。

[0028] 在第四方面，本公开文本提供了增强、刺激和/或增加有需要的受试者的免疫应答的方法，所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的式(I)的化合物或其药学上可接受的盐。在第二方面的第一实施方案中，所述方法进一步包括在式(I)的化合物或其药学上可接受的盐之前、之后或与其同时施用另外的药剂。在第二实施方案中，所述另外的药剂选自抗微生物剂、抗病毒剂、细胞毒性剂、TLR7激动剂、TLR8激动剂、HDAC抑制剂和免疫应答调节剂。

[0029] 在第五方面，本公开文本提供了抑制有需要的受试者的癌细胞的生长、增殖或转移的方法，所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的式(I)的化合物或其药学上可接受的盐。在第三方面的第一实施方案中，所述癌症选自黑色素瘤、肾细胞癌、鳞状非小细胞肺癌(NSCLC)、非鳞状NSCLC、结直肠癌、去势抵抗性前列腺癌、卵巢癌、胃癌、肝细胞癌、胰腺癌、头颈部鳞状细胞癌、食道癌、胃肠道癌和乳腺癌以及血液恶性肿瘤。

[0030] 在第六方面，本公开文本提供了治疗有需要的受试者的感染性疾病的方法，该方法包括向该受试者给予治疗有效量的式(I)的化合物或其药学上可接受的盐。在第四方面

的第一实施方案中，所述感染性疾病是由病毒引起的。在第二实施方案中，所述病毒选自HIV、甲型肝炎病毒、乙型肝炎病毒、丙型肝炎病毒、疱疹病毒和流感病毒。

[0031] 在第七方面，本公开文本提供了治疗有需要的受试者的脓毒性休克的方法，该方法包括向该受试者给予治疗有效量的式(I)的化合物或其药学上可接受的盐。

[0032] 在第八方面，本公开文本提供了阻断受试者的PD-L1与PD-1和/或CD80的相互作用的方法，所述方法包括向所述受试者施用治疗有效量的式(I)的化合物或其药学上可接受的盐。

## 具体实施方式

[0033] 除非另有指明，否则具有不饱和化合价的任何原子被假定为具有足以满足所述化合价的氢原子。

[0034] 除非上下文另外指示，否则单数形式“一个/一种(a)”、“一个/一种(an)”和“所述”包括复数指示物。

[0035] 如本文所用，术语“或”是逻辑分离(即，和/或)并且不指示排他性分离，除非诸如用术语“或者”、“除非”、“可替代地”和类似作用的词语明确指示。

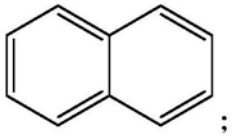
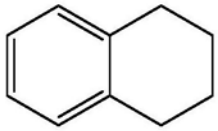
[0036] 如本文所用，术语“烷基”是指含有例如从1至12个碳原子、从1至6个碳原子和从1至4个碳原子的支链和直链饱和脂族烃基团二者。烷基的例子包括但不限于甲基(Me)、乙基(Et)、丙基(例如，正丙基和异丙基)、丁基(例如，正丁基、异丁基、仲丁基、和叔丁基)、和戊基(例如，正戊基、异戊基、新戊基)、正己基、2-甲基戊基、2-乙基丁基、3-甲基戊基、和4-甲基戊基。当数字出现在符号“C”之后的下标中时，下标更具体地定义了特定基团可能含有的碳原子的数目。例如，“$C_{1-4}$烷基”表示具有一至四个碳原子的直链和支链烷基。

[0037] 如本文所用的术语“芳基”是指通过除去与一个或多个芳族环键合的一个氢而由含该一个或多个芳族环的分子衍生的一组原子。芳基的代表性例子包括但不限于苯基和萘基。芳基环可以是未取代的或者在化合价允许的情况下可以含有一个或多个取代基。

[0038] 如本文所用，术语“双环碳环基团”是指具有五至十四个碳原子和零个杂原子的稠合螺环或桥接双环体系。双环体系的每个环可以是饱和的、芳族的或部分不饱和的。本公开文本的双环碳环基团可以通过所述基团中的任何可取代的碳原子附接至母体分子部分。双环碳环基团的代表性例子包括但不限于茚满基、茚基、萘基、二氢萘基、四氢萘基、六氢萘基、八氢萘基、十氢萘基、双环庚基、双环辛基和双环壬基。

[0039] 在某些实施方案中，所述双环碳环基团具有至少一个饱和的或部分饱和的非芳族环。在一些实施方案中，所述双环基团具有两个芳族环。

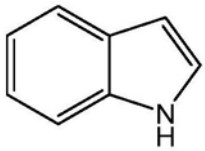
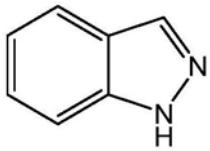
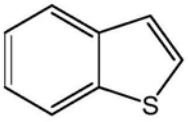
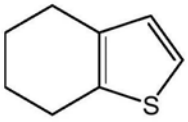
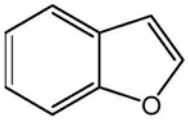
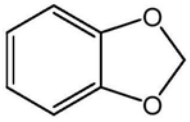
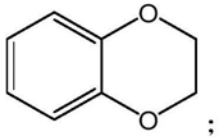
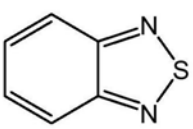
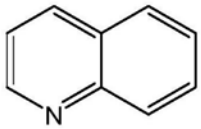
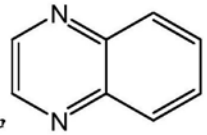
[0040] 在某些实施方案中，所述双环碳环基团选自

；并且

其中每个基团可以如本文定义的被取代。

[0041] 如本文所用，术语“双环杂环基”是指与四元至六元芳族或非芳族碳环或另一个单环杂环基稠合的单环杂环基环。本公开文本的双环杂环基通过所述基团中的碳原子附接至母体分子部分。双环杂环基的例子包括但不限于苯并噻吩基、吲哚啉基、吲哚基和吡咯并吡

啶基。

[0042] 在某些实施方案中，所述三环碳环基团选自；；；；；；；；；和；

其中每个基团可以如本文定义的被取代。

[0043] 如本文所用，术语“$C_3$-$C_6$环烷基”是指具有三至六个碳原子和零个杂原子的饱和单环烃环体系。$C_3$-$C_6$环烷基的例子包括但不限于环丙基、环丁基、环戊基和环己基。

[0044] 如本文所用，术语“卤基”和“卤素”是指F、Cl、Br或I。

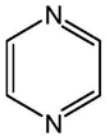
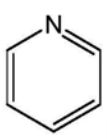
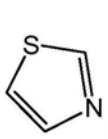
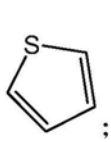
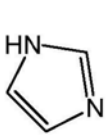
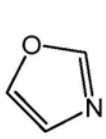
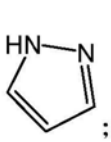
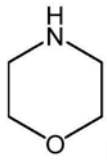
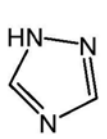
[0045] 如本文所用，术语“卤代$C_1$-$C_3$烷基”是指被一个或多个卤素原子取代的$C_1$-$C_3$烷基。

[0046] 如本文所用，术语“卤代$C_1$-$C_{10}$烷基”是指被一个或多个卤素原子取代的$C_1$-$C_{10}$烷基。

[0047] 在一些实施方案中，术语“卤代烷基”包括术语“氟烷基”，如本文所用，“氟烷基”旨在包括被一个或多个氟原子取代的支链和直链饱和脂族烃基团二者。例如，“$C_{1-4}$氟烷基”旨在包括被一个或多个氟原子取代的$C_1$、$C_2$、$C_3$和$C_4$烷基。氟烷基的代表性例子包括但不限于-$CF_3$和-$CH_2CF_3$。

[0048] 如本文所用，术语“单环杂环基”是指含有独立地选自氮、氧和硫的一、二或三个杂原子的五元、六元或七元环。五元环具有零至两个双键，并且六元环和七元环具有零至三个双键。本公开文本的杂环基通过所述基团中的碳原子或氮原子附接至母体分子部分。单环杂环基的例子包括但不限于呋喃基、咪唑基、异噻唑基、异噁唑基、吗啉基、噁唑基、哌嗪基、哌啶基、吡唑基、吡啶基、吡咯烷基、吡咯基、噻唑基、噻吩基和硫代吗啉基。

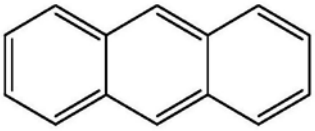
[0049] 在某些实施方案中，所述单环碳环基团选自

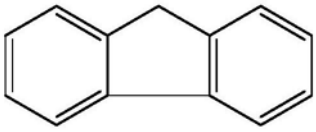
；；；；；；；；；

其中每个基团可以如本文定义的被取代。

[0050] 如本文所用，术语“三环碳环基团”是指具有五至十八个碳原子和零个杂原子的稠合螺环或桥接三环体系。三环体系的每个环可以是饱和的、芳族的或部分不饱和的。本公开文本的三环碳环基团可以通过所述基团中的任何可取代的碳原子附接至母体分子部分。三环碳环基团的代表性例子包括但不限于。

[0051] 在某些实施方案中，所述三环碳环基团具有至少一个饱和的或部分饱和的非芳族环。在一些实施方案中，所述三环基团具有三个芳族环。

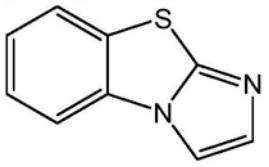
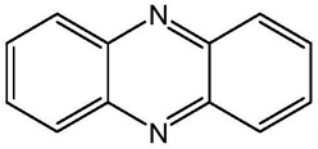
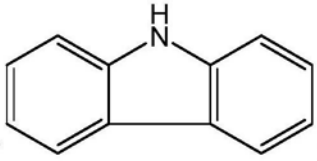
[0052] 在某些实施方案中，所述三环碳环基团选自；和

；

其中每个基团可以如本文定义的被取代。

[0053] 如本文所用，术语“三环杂环基”是指与四元至六元芳族或非芳族碳环或单环杂环基稠合的双环杂环基环。本公开文本的三环杂环基通过所述基团中的碳原子或氮原子附接至母体分子部分。三环杂环基的例子包括但不限于吖啶(acridine)、咔唑(carbazole)、咔啉(carboline)、二苯并对二噁英(oxanthrene)、菲咯啉(phanthroline)、噻蒽(thianthrene)和呫吨(xanthene)。

[0054] 在某些实施方案中，所述三环杂环基选自：

；；和；

其中每个基团可以如本文定义的被取代。

[0055] 如本文所用，短语“或其药学上可接受的盐”是指至少一种化合物，或所述化合物的至少一种盐，或其组合。例如，“式(I)的化合物或其药学上可接受的盐”包括但不限于式(I)的化合物、两种式(I)的化合物、式(I)的化合物的药学上可接受的盐、式(I)的化合物和式(I)的化合物的一种或多种药学上可接受的盐、以及式(I)的化合物的两种或更多种药学上可接受的盐。

[0056] 术语“免疫应答”是指例如淋巴细胞、抗原呈递细胞、吞噬细胞、粒细胞和可溶性大分子的作用，其导致对人体的选择性损伤、破坏或从人体消除入侵的病原体、被病原体感染的细胞或组织、癌细胞，或者在自身免疫或病理炎症的情况下，消除正常的人细胞或组织。

[0057] 术语“程序性死亡配体1”、“程序性细胞死亡配体1”、“PD-L1”、“PDL1”、“hPD-L1”、“hPD-LI”和“B7-H1”可互换使用，并且包括人PD-L1的变体、同种型、物种同源物以及与PD-L1具有至少一个共同表位的类似物。完整的PD-L1序列可以在GENBANK®登录号NP_054862下找到。

[0058] 术语“程序性死亡1”、“程序性细胞死亡1”、“蛋白质PD-1”、“PD-1”、“PD1”、“hPD-1”和“hPD-I”可互换使用，并且包括人PD-1的变体、同种型、物种同源物以及与PD-1具有至少一个共同表位的类似物。完整的PD-1序列可以在GENBANK®登录号U64863下找到。

[0059] 术语“治疗”是指抑制疾病、障碍或病症，即阻止其发展和/或缓解疾病、障碍或病症，即引起疾病、障碍和/或病症和/或与所述疾病、障碍和/或病症相关的症状的消退。

[0060] 本公开文本旨在包括本发明的化合物中存在的原子的所有同位素。同位素包括原子数相同但质量数不同的那些原子。通过一般举例而非限制的方式，氢的同位素包括氘和氚。碳的同位素包括$^{13}C$和$^{14}C$。本公开文本的同位素标记的化合物通常可以通过本领域技术

人员已知的常规技术或通过与本文所述的那些类似的方法使用适当的同位素标记的试剂代替所使用的非标记的试剂来制备。此类化合物可以具有很多潜在的用途，例如在测定生物活性时作为标准和试剂。在稳定同位素的情况下，此类化合物可以具有有利地改变生物学、药理学或药物动力学特性的潜力。

[0061] 本文所述主题的另一个方面是所公开的化合物作为放射性标记的配体的用途，其用于开发配体结合测定或用于监测体内吸附、代谢、分布、受体结合或占据或化合物处置。例如，本文所述的大环化合物可以使用放射性同位素制备，并且所得放射性标记的化合物可以用于开发结合测定或用于代谢研究。可替代地并且出于同样的目的，本文所述的大环化合物可以通过使用本领域技术人员已知的方法进行催化氚化而转化为放射性标记的形式。

[0062] 通过使用本领域技术人员已知的方法添加放射性示踪剂，本公开文本的大环化合物还可以用作PET显像剂。

[0063] 本领域普通技术人员知道氨基酸包括由以下通用结构表示的化合物：




L-或S-α-氨基酸（如果R=H） D-或R-α-氨基酸（如果R=H）

其中R和R'是如本文所讨论的。除非另有指示，否则如本文所用术语“氨基酸”，单独或作为另一基团的一部分，包括但不限于连接到同一个碳(称为“α”碳)的氨基和羧基，其中R和/或R'可以是天然或非天然侧链，包括氢。“α”碳处的绝对“S”构型通常被称为“L”或“天然”构型。在“R”和“R'”(')取代基二者都等于氢的情况下，氨基酸是甘氨酸并且不是手性的。

[0064] 在没有具体指定的情况下，本文所述的氨基酸可以是D-或L-立体化学并且可以如本公开文本的其他地方所述被取代。应理解，当未指定立体化学时，本公开文本涵盖具有抑制PD-1与PD-L1和/或CD80和PD-L1之间相互作用的能力的所有立体化学异构形式或其混合物。化合物的单个立体异构体可以从含有手性中心的可商购的起始材料合成制备，或者通过制备对映异构体产物的混合物，然后进行分离，诸如转化为非对映体的混合物，然后分离或重结晶、色谱技术或在手性色谱柱上的对映异构体的直接分离来制备。特定立体化学的起始化合物是可商购的或可以通过本领域已知的技术制造和拆分。

[0065] 本公开文本的某些化合物可以以可分离的不同的稳定构象形式存在。由于围绕不对称单键的旋转受限(例如，由于空间位阻或环应变)导致的扭转不对称性可能允许不同构象异构体的分离。本公开文本包括这些化合物的每种构象异构体及其混合物。

[0066] 本公开文本的某些化合物可以以互变异构体存在，所述互变异构体是由分子的质子转移至所述分子内的不同原子的现象产生的化合物。术语“互变异构体”还指平衡存在并且容易从一种异构体转化为另一种异构体的两种或更多种结构异构体中的一种。本文所述的化合物的所有互变异构体均包括在本公开文本内。

[0067] 本公开文本的药物化合物可以包括一种或多种药学上可接受的盐。“药学上可接受的盐”是指保留母体化合物的所希望生物活性并且不赋予任何不希望的毒理作用的盐

(参见例如Berge,S.M.等人,J.Pharm.Sci.,66:1-19(1977))。盐可以在本文所述化合物的最终分离和纯化过程中获得,或者通过使化合物的游离碱官能团与合适的酸反应或通过使化合物的酸性基团与合适的碱反应来单独获得。酸加成盐包括衍生自无毒无机酸(诸如盐酸、硝酸、磷酸、硫酸、氢溴酸、氢碘酸、亚磷酸等)以及衍生自无毒有机酸(诸如脂族单羧酸和脂族二羧酸、苯基取代的链烷酸、羟基链烷酸、芳族酸、脂族和芳族磺酸等)的那些。碱加成盐包括衍生自碱土金属(诸如钠、钾、镁、钙等)以及衍生自无毒有机胺(诸如N,N'-二苄基乙二胺、N-甲基葡糖胺、氯普鲁卡因、胆碱、二乙醇胺、乙二胺、普鲁卡因等)的那些。

[0068] 本文所述的治疗剂的施用包括但不限于治疗有效量的治疗剂的施用。如本文所用的术语"治疗有效量"是指但不限于治疗通过施用包含本文所述的PD-1/PD-L1结合抑制剂的组合物可治疗的病症的治疗剂的量。所述量是足以展现出可检测的治疗或改善效果的量。所述效果可以包括例如但不限于治疗本文列出的病症。对于受试者的精确有效量将取决于受试者的体型和健康状况、所治疗的病症的性质和程度、治疗医师的建议以及选择用于施用的治疗剂或治疗剂的组合。因此,预先指定确切的有效量是没有用的。

[0069] 在另一方面,本公开文本涉及使用本公开文本的大环化合物抑制受试者的肿瘤细胞生长的方法。如本文所证明,本公开文本的化合物能够与PD-L1结合、破坏PD-L1与PD-1之间的相互作用、与已知阻断与PD-1相互作用的抗PD-1单克隆抗体竞争与PD-L1的结合、增强CMV特异性T细胞IFNγ分泌、以及增强HIV特异性T细胞IFNγ分泌。因此,本公开文本的化合物可用于改变免疫应答、治疗疾病诸如癌症或感染性疾病、刺激保护性自身免疫应答或刺激抗原特异性免疫应答(例如,通过与目的抗原共施用PD-L1阻断化合物)。

药物组合物

[0070] 在另一方面,本公开文本提供了含有与药学上可接受的载体一起配制的本公开文本内所述的一种化合物或化合物组合的组合物,例如药物组合物。本公开文本的药物组合物也可以在组合疗法中施用,即与其他药剂组合施用。例如,组合疗法可以包括与至少一种其他抗炎剂或免疫抑制剂组合的大环化合物。可以在组合疗法中使用的治疗剂的例子在下文关于本公开文本的化合物的用途的部分中更详细地进行了描述。

[0071] 如本文所用,"药学上可接受的载体"包括生理上可相容的任何和所有溶剂、分散介质、包衣剂、抗细菌剂和抗真菌剂、等张剂和吸收延迟剂等。在一些实施方案中,所述载体适用于静脉内、肌内、皮下、肠胃外、脊髓或表皮施用(例如,通过注射或输注)。根据施用途径,可以将活性化合物包被在材料中以保护所述化合物免受可能使所述化合物失活的酸和其他天然条件的作用。

[0072] 本公开文本的药物组合物还可以包括药学上可接受的抗氧化剂。药学上可接受的抗氧化剂的例子包括:(1)水溶性抗氧化剂,诸如抗坏血酸、半胱氨酸盐酸盐、硫酸氢钠、焦亚硫酸钠、亚硫酸钠等;(2)油溶性抗氧化剂,诸如抗坏血酸棕榈酸酯、丁基化羟基茴香醚(BHA)、丁基化羟基甲苯(BHT)、卵磷脂、没食子酸丙酯、α-生育酚等;以及(3)金属螯合剂,诸如柠檬酸、乙二胺四乙酸(EDTA)、山梨糖醇、酒石酸、磷酸等。

[0073] 可以使用本领域中已知的多种方法中的一种或多种,通过一种或多种施用途径来施用本公开文本的药物组合物。如熟练技术人员将理解的,施用的途径和/或模式将根据期望的结果而变化。在一些实施方案中,本公开文本的大环化合物的施用途径包括静脉内、肌内、皮内、腹膜内、皮下、脊柱或其他肠胃外施用途径,例如通过注射或输注。如本文所用,短

语“肠胃外施用”意指除了肠施用和局部施用之外的施用模式，通常通过注射，并且包括但不限于静脉内、肌内、动脉内、鞘内、囊内、眼眶内、心脏内、皮内、腹膜内、经气管、皮下、表皮下、关节内、囊下、蛛网膜下、脊柱内、硬膜外以及胸骨内注射和输注。

[0074] 无菌可注射溶液可以通过以下方式制备：将活性化合物以所需量掺入具有上文所列举的一种成分或成分组合(视需要)的适当溶剂中，然后过滤灭菌。通常，通过将活性化合物掺入无菌媒介物中来制备分散体，所述无菌媒介物含有碱性分散介质和来自上文所列举的那些的所需其他成分。在用于制备无菌可注射溶液的无菌粉末的情况下，一些制备方法为真空干燥和冷冻干燥(冻干)，所述真空干燥和冷冻干燥由先前无菌过滤的溶液产生活性成分和任何另外的所需成分的粉末。

[0075] 可以用于本公开文本的药物组合物中的合适的水性和非水性载体的例子包括水、乙醇、多元醇(诸如甘油、丙二醇、聚乙二醇等)及其合适的混合物、植物油(诸如橄榄油)和可注射有机酯(诸如油酸乙酯)。例如，通过使用包衣材料(诸如卵磷脂)、在分散体的情况下通过维持所需粒度、以及通过使用表面活性剂，可以维持适当的流动性。

[0076] 这些组合物还可以含有佐剂，诸如防腐剂、润湿剂、乳化剂和分散剂。可以通过上述灭菌程序以及通过包含各种抗细菌剂和抗真菌剂(例如，对羟基苯甲酸酯，氯丁醇，苯酚山梨酸等)两种方法来确保防止微生物的存在。还可能令人希望的是在组合物中包含等渗剂，诸如糖、氯化钠等。另外，可以通过包含延迟吸收的药剂(诸如单硬脂酸铝和明胶)来实现可注射药物形式的延迟吸收。

[0077] 药学上可接受的载体包括无菌水性溶液或分散体以及用于临时制备无菌可注射溶液或分散体的无菌粉末。此类介质和试剂用于药学活性物质的用途是本领域已知的。除非任何常规介质或药剂与活性化合物不相容，否则考虑其在本公开文本的药物组合物中的用途。也可以将补充性活性化合物掺入组合物中。

[0078] 在制造和储存条件下，治疗性组合物通常必须是无菌且稳定的。可以将组合物配制成溶液、微乳剂、脂质体或其他适合高药物浓度的有序结构。载体可以是溶剂或分散介质，所述溶剂或分散介质含有例如水、乙醇、多元醇(例如，甘油、丙二醇和液体聚乙二醇等)及其合适的混合物。例如通过使用包衣(诸如卵磷脂)，在分散液的情况下通过维持所需的粒度，以及通过使用表面活性剂，可以维持适当的流动性。在许多情况下，希望在组合物中包含等渗剂，例如糖、多元醇(诸如甘露糖醇、山梨糖醇)或氯化钠。通过在所述组合物中包含延迟吸收的药剂(例如，单硬脂酸盐和明胶)可以实现可注射组合物的延长吸收。

[0079] 可替代地，本公开文本的化合物可以经由非肠胃外途径施用，诸如局部、表皮或粘膜施用途径，例如鼻内、口服、阴道、直肠、舌下或局部施用。

[0080] 本文预期的任何药物组合物可以例如通过任何可接受且合适的口服制剂口服递送。示例性的口服制剂包括但不限于例如片剂、锭剂、糖锭剂、水性和油性混悬剂、可分散散剂或颗粒剂、乳剂、硬和软胶囊、液体胶囊、糖浆和酏剂。旨在用于口服施用的药物组合物可以根据本领域已知的用于制造旨在用于口服施用的药物组合物的任何方法制备。为了提供药学上可口的制剂，根据本公开文本的药物组合物可以含有至少一种选自甜味剂、调味剂、着色剂、缓和剂、抗氧化剂、和防腐剂的试剂。

[0081] 片剂可以例如通过将至少一种式(I)的化合物和/或其至少一种药学上可接受的盐与适合于制造片剂的至少一种无毒的药学上可接受的赋形剂混合来制备。示例性的赋形

剂包括但不限于例如惰性稀释剂，例如像碳酸钙、碳酸钠、乳糖、磷酸钙和磷酸钠；制粒剂和崩解剂，例如像微晶纤维素、交联羧甲基纤维素钠、玉米淀粉和海藻酸；粘合剂，例如像淀粉、明胶、聚乙烯吡咯烷酮和阿拉伯胶；以及润滑剂，例如像硬脂酸镁、硬脂酸和滑石。另外，片剂可以是未包衣的，或通过已知技术包衣，以掩蔽尝起来令人不快的药物的不良味道，或延迟胃肠道中活性成分的崩解和吸收，从而维持活性成分的作用持续更长时间。示例性的水溶性味道掩蔽材料包括但不限于羟丙基甲基纤维素和羟丙基纤维素。示例性的延时材料包括但不限于乙基纤维素和乙酸丁酸纤维素。

[0082] 硬明胶胶囊可以例如通过将至少一种式(I)的化合物和/或其至少一种盐与至少一种惰性固体稀释剂(例如像碳酸钙、磷酸钙和高岭土)混合来制备。

[0083] 软明胶胶囊可以例如通过将至少一种式(I)的化合物和/或其至少一种药学上可接受的盐与至少一种水溶性载体(例如像聚乙二醇)和至少一种油介质(例如像花生油、液体石蜡和橄榄油)混合来制备。

[0084] 水性混悬剂可以例如通过将至少一种式(I)的化合物和/或其药学上可接受的盐与至少一种适合于制造水性混悬剂的赋形剂混合来制备，所述赋形剂包括但不限于例如助悬剂，例如像羧甲基纤维素钠、甲基纤维素、羟丙基甲基纤维素、海藻酸钠、海藻酸、聚乙烯吡咯烷酮、黄蓍胶和阿拉伯树胶；分散剂或润湿剂，例如像天然存在的磷脂，例如卵磷脂；环氧烷与脂肪酸的缩合产物，例如像聚氧乙烯硬脂酸酯；环氧乙烷与长链脂族醇的缩合产物，例如像十七烷乙烯-氧基鲸蜡醇；环氧乙烷与衍生自脂肪酸和己糖醇的偏酯的缩合产物，例如像聚氧乙烯山梨糖醇单油酸酯；以及环氧乙烷与衍生自脂肪酸和己糖醇酐的偏酯的缩合产物，例如像聚乙烯脱水山梨糖醇单油酸酯。水性混悬剂还可以含有至少一种防腐剂，例如像对羟基苯甲酸乙酯和对羟基苯甲酸正丙酯；至少一种着色剂；至少一种调味剂；和/或至少一种甜味剂，包括但不限于例如蔗糖、糖精和阿斯巴甜。

[0085] 油性混悬剂可以例如通过将至少一种式(I)的化合物和/或其至少一种药学上可接受的盐悬浮在植物油(例如像花生油、芝麻油和椰子油)或者悬浮在矿物油(例如像液体石蜡)中来制备。油性混悬剂还可以含有至少一种增稠剂，例如像蜂蜡、硬石蜡和十六醇。为了提供可口的油性混悬剂，可以将上文所述的至少一种甜味剂和/或至少一种调味剂添加到油性混悬剂中。油性混悬剂可以进一步含有至少一种防腐剂，包括但不限于例如抗氧化剂，例如像丁基化羟基茴香醚和β-生育酚。

[0086] 可分散散剂和颗粒剂可以例如通过将至少一种式(I)的化合物和/或其至少一种药学上可接受的盐与至少一种分散剂和/或润湿剂、至少一种助悬剂和/或至少一种防腐剂混合来制备。合适的分散剂、润湿剂和助悬剂在上文已经描述。示例性的防腐剂包括但不限于例如抗氧化剂，例如抗坏血酸。此外，可分散散剂和颗粒剂还可以含有至少一种赋形剂，包括但不限于例如甜味剂、调味剂和着色剂。

[0087] 至少一种式(I)的化合物和/或其至少一种药学上可接受的盐的乳剂可以例如制备为水包油乳剂。包含式(I)的化合物的乳剂的油相可以以已知方式由已知成分构成。油相可以通过但不限于例如植物油(例如像橄榄油和花生油)、矿物油(例如像液体石蜡)及其混合物来提供。虽然所述相可以仅包含乳化剂，但是它可以包含至少一种乳化剂与脂肪或油或与脂肪和油两者的混合物。合适的乳化剂包括但不限于例如天然存在的磷脂，例如大豆卵磷脂；衍生自脂肪酸和己糖醇酐的酯或偏酯，例如像脱水山梨糖醇单油酸酯；以及偏酯与

环氧乙烷的缩合产物，例如像聚氧乙烯脱水山梨糖醇单油酸酯。在一些实施方案中，亲水性乳化剂与亲脂性乳化剂一起被包含，所述亲脂性乳化剂用作稳定剂。有时还希望包含油和脂肪二者。一种或多种乳化剂与或不与一种或多种稳定剂一起构成所谓的乳化蜡，并且蜡与油和脂肪一起构成所谓的乳化软膏基质，其形成乳膏配制品的油性分散相。乳剂还可以含有甜味剂、调味剂、防腐剂和/或抗氧化剂。适合于本公开文本配制品的乳化剂和乳剂稳定剂包括Tween 60、Span 80、十六十八醇、肉豆蔻醇、单硬脂酸甘油酯、十二烷基硫酸钠、单独或与蜡一起的二硬脂酸甘油酯、或本领域熟知的其他材料。

[0088] 可以将活性化合物与将保护化合物免于快速释放的载体一起制备，诸如控释配制品，包括植入物、透皮贴剂和微囊递送系统。可以使用可生物降解的可生物相容的聚合物，诸如乙烯乙酸乙烯酯、聚酸酐、聚乙醇酸、胶原、聚原酸酯和聚乳酸。用于制备此类配制品的许多方法已经获得专利或通常是本领域技术人员已知的。参见例如Robinson,J.R.编辑,Sustained and Controlled Release Drug Delivery Systems,Marcel Dekker,Inc.,纽约(1978)。

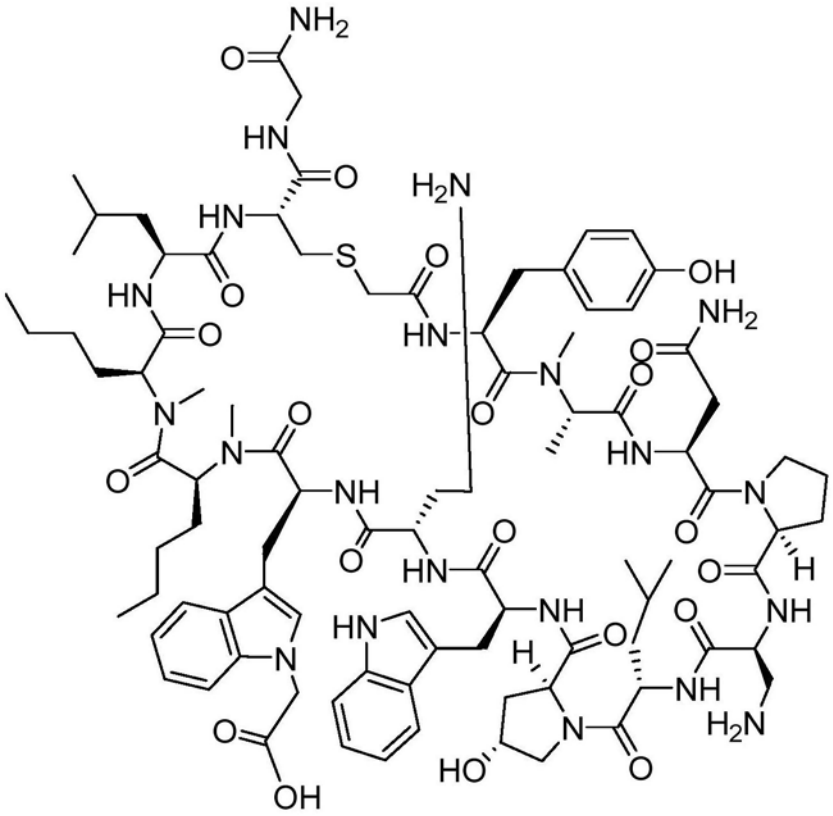
[0089] 可以用本领域已知的医疗装置施用治疗性组合物。例如，在一个实施方案中，可以将本公开文本的治疗性组合物用无针皮下注射装置(诸如在美国专利号5,399,163、5,383,851、5,312,335、5,064,413、4,941,880、4,790,824或4,596,556中披露的装置)施用。可用于本公开文本的熟知的植入物和模块的例子包括：美国专利号4,487,603，其披露了一种用于以受控制的速率分配药物的可植入的微输注泵；美国专利号4,486,194，其披露了用于通过皮肤施用药物的治疗装置；美国专利号4,447,233，其披露了用于以精确的输注速率递送药物的药物输注泵；美国专利号4,447,224，其披露了用于连续药物递送的可变流量可植入输注设备；美国专利号4,439,196，其披露了具有多室区室的渗透性药物递送系统；和美国专利号4,475,196，其披露了渗透性药物递送系统。将这些专利通过引用并入本文。许多其他此类植入物、递送系统和模块是本领域技术人员已知的。

[0090] 在某些实施方案中，可以配制本公开文本的化合物以确保适当的体内分布。例如，血脑屏障(BBB)排斥许多高度亲水性化合物。为了确保本公开文本的治疗性化合物穿过BBB(如果希望)，可以将它们配制在例如脂质体中。对于制造脂质体的方法，参见例如美国专利号4,522,811、5,374,548和5,399,331。脂质体可以包含选择性地转移到特定细胞或器官中从而增强靶向药物递送的一个或多个部分(参见例如Ranade,V.V.,J.Clin.Pharmacol.,29:685(1989))。示例性的靶向部分包括叶酸或生物素(参见例如Low等人的美国专利号5,416,016)；甘露糖苷(Umezawa等人,Biochem.Biophys.Res.Commun.,153:1038(1988))；大环化合物(Bloeman,P.G.等人,FEBS Lett.,357:140(1995)；Owais,M.等人,Antimicrob.Agents Chemother.,39:180(1995))；表面蛋白A受体(Briscoe等人,Am.J.Physiol.,1233:134(1995))；p120(Schreier等人,J.Biol.Chem.,269:9090(1994))；还参见Keinanen,K.等人,FEBS Lett.,346:123(1994)；Killion,J.J.等人,Immunomethods 4:273(1994)。

[0091] 所述化合物可以通过本领域已知的方法(包括下文所述的那些方法并且包括本领域技术内的变化)来制备。一些试剂和中间体是本领域已知的。其他试剂和中间体可以使用可溶液获得的材料通过本领域已知的方法来制备。用于描述化合物的合成的任何变量(例如，编号“R”的取代基)仅旨在说明如何制备化合物，而不应与权利要求中或本说明书的其

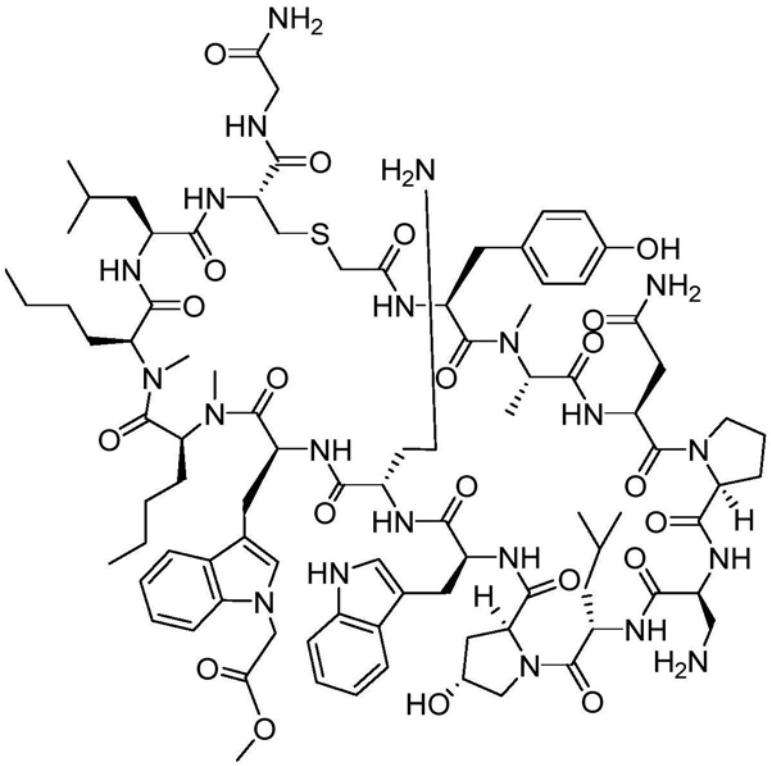
他部分中使用的变量混淆。以下方法用于说明目的，并且不旨在限制本公开文本的范围。

[0092] 所述方案中使用的缩写通常遵循本领域中使用的惯例。说明书和实施例中使用的化学缩写是如以下定义的：Et3N或TEA表示三甲胺；iPrNEt2或DIPEA或DIEA表示二异丙基乙胺；THF表示四氢呋喃；DME表示1,2-二甲氧基乙烷；MeOH表示甲醇；EtOH表示乙醇；HCTU表示1-[双(二甲基氨基)亚甲基]-5-氯苯并三唑鎓3-氧化物六氟磷酸盐或N,N,N′,N′-四甲基-O-(6-氯-1H-苯并三唑-1-基)脲鎓六氟磷酸盐；HATU表示1-[双(二甲基氨基)亚甲基]-1H-1,2,3-三唑并[4,5-b]吡啶鎓3-氧化物六氟磷酸盐或N-[(二甲基氨基)-1H-1,2,3-三唑并-[4,5-b]吡啶-1-基亚甲基]-N-甲基甲胺鎓六氟磷酸盐N-氧化物；HOBt表示1-羟基苯并三唑水合物；DMF表示N,N-二甲基甲酰胺；min或mins表示分钟；h或hr或hrs表示小时；ACN或MeCN表示乙腈；rt”表示室温或保留时间(上下文将规定)；TFA表示三氟乙酸；EtOAc表示乙酸乙酯；以及DTT表示二硫苏糖醇(克莱兰(Cleland)试剂)。



实施例1-BMT-001

[0093] 根据WO2014/151634中所述的程序制备实施例1(BMT-001)。



实施例2-BMT-002

[0094] 将(重氮甲基)三甲基硅烷(0.079mL,在醚中2M)添加到实施例1(100mg)在2mL THF/MeOH(4/1)中的溶液中。将反应在室温下搅拌24小时。在真空下去除所有溶剂后,通过制备型HPLC纯化残余物以提供所希望的产物。

化合物制备的通用程序:

[0095] 将实施例1(BMT-001)或实施例2(BMT-0002)(1当量)、适当的亲电子试剂(1-20当量)和$Et_3N$或$iPr_2NEt$(0-200当量)在THF、二噁烷、DME、MeOH、或EtOH中的混合物在室温至100℃下搅拌0.5至48小时,然后用甲醇或水淬灭。在真空下去除溶剂后,将残余物通过制备型HPLC纯化以得到化合物。

用于化合物制备的可替代程序I

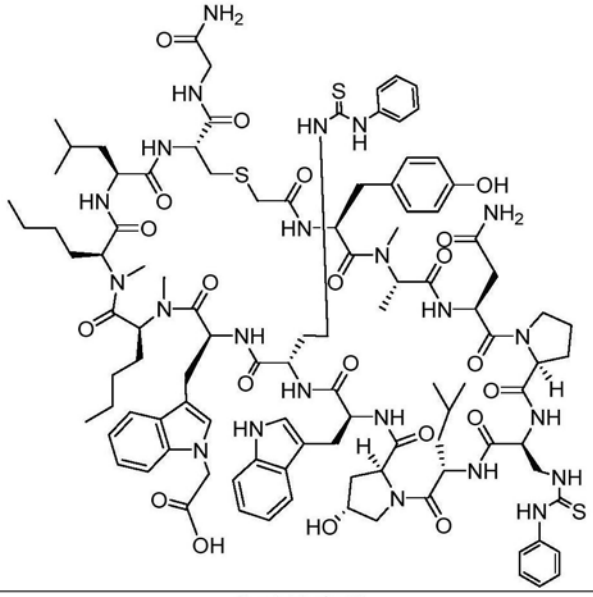
[0096] 将$Et_3N$或$iPr_2NEt$(1-200当量)添加到适当的亲电子试剂(1-20当量)、HCTU、HATU、或HOBt(1-20当量)在DMF、THF、二噁烷、或DME中的溶液中。将混合物在室温下搅拌24h后,添加实施例1(BMT-001)或实例2(BMT-002)(1当量)。然后将反应在室温至100℃下搅拌0.5至48小时,然后用甲醇或水淬灭。在真空下去除溶剂后,将残余物通过制备型HPLC纯化以得到化合物。

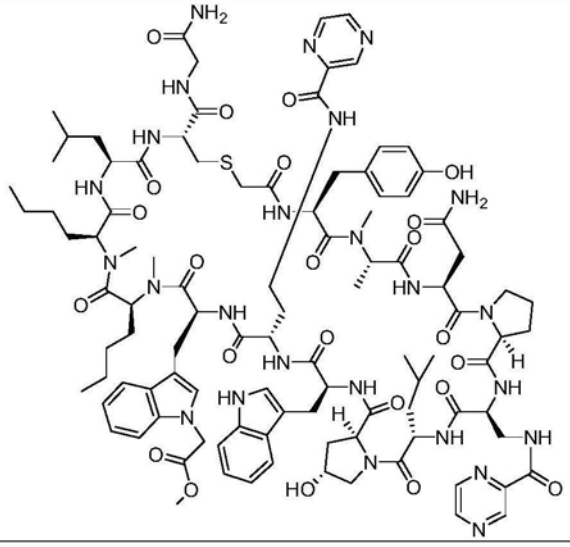
用于化合物制备的可替代程序II

[0097] 将实施例1或实施例2(1当量)、第一亲电子试剂(1-20当量)和$Et_3N$或$iPr_2NEt$(0-200当量)在THF、二噁烷、DME、MeOH、或EtOH中的混合物在室温至100℃下搅拌0.5至48小时。然后,添加第二亲电子试剂(1-20当量)并且将所得的混合物在室温至100℃下搅拌0.5至48小时,然后用甲醇或水淬灭。在真空下去除溶剂后,将残余物通过制备型HPLC纯化以得到化合物。

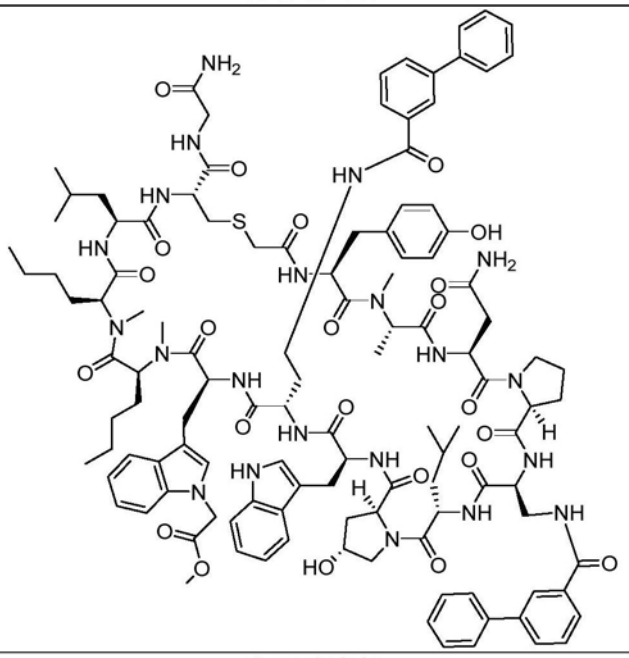
[0098] 下文所示的化合物是使用上述程序从实施例1(BMT-001)或实施例2(BMT-002)制备的。

[0099] 在上述程序后,制备以下化合物:

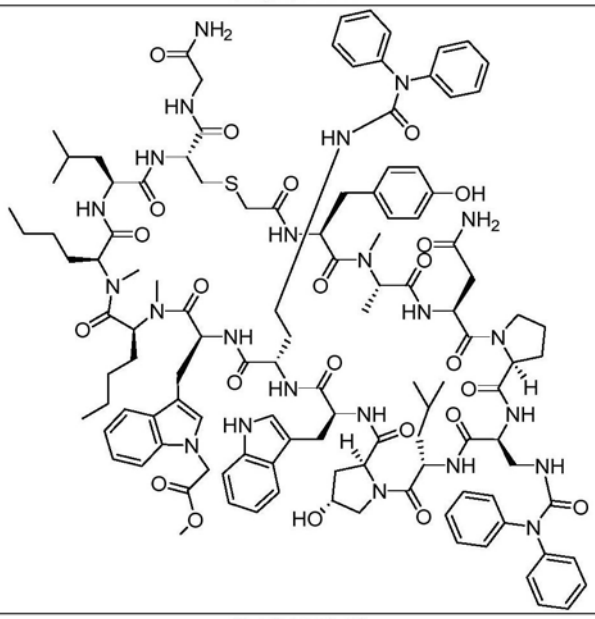
| 化合物1001 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1079 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1079 |
| 保留时间 | 1.65 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 : 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1002 |
| --- |
|  |

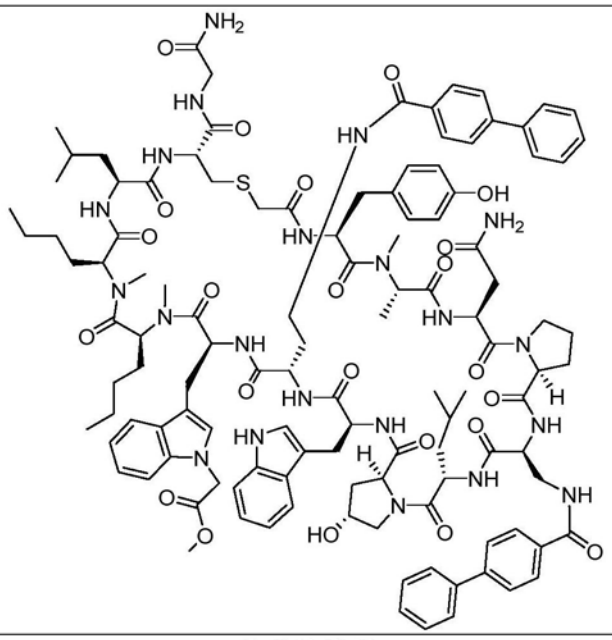
| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 2-吡嗪甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1057 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1057 |
| 保留时间 | 1.84 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1003 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 3-联苯基甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1131 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1131 |
| 保留时间 | 3.36 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 10 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 4 min |
| 流速 | 0.8 mL/min |

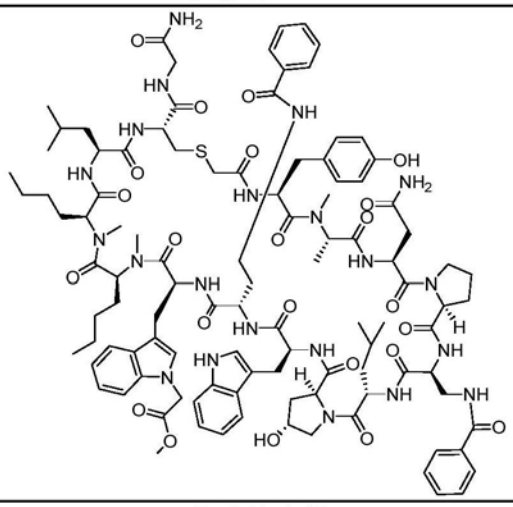
| | |
|---|---|
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 50x2, 3u |

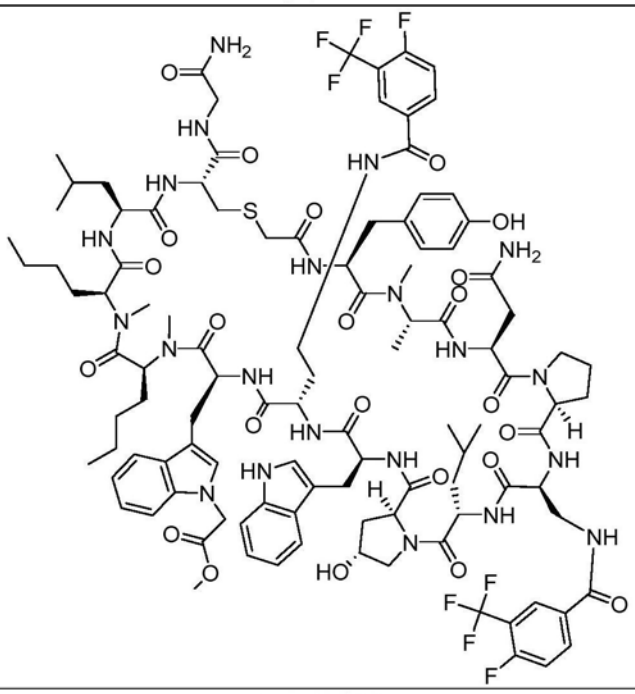
| 化合物1004 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 二苯基氨基甲酰氯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1146 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1146 |
| 保留时间 | 3.41 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 10 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 4 min |
| 流速 | 0.8 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40 ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 50x2, 3u |

| 化合物1005 |
|---|

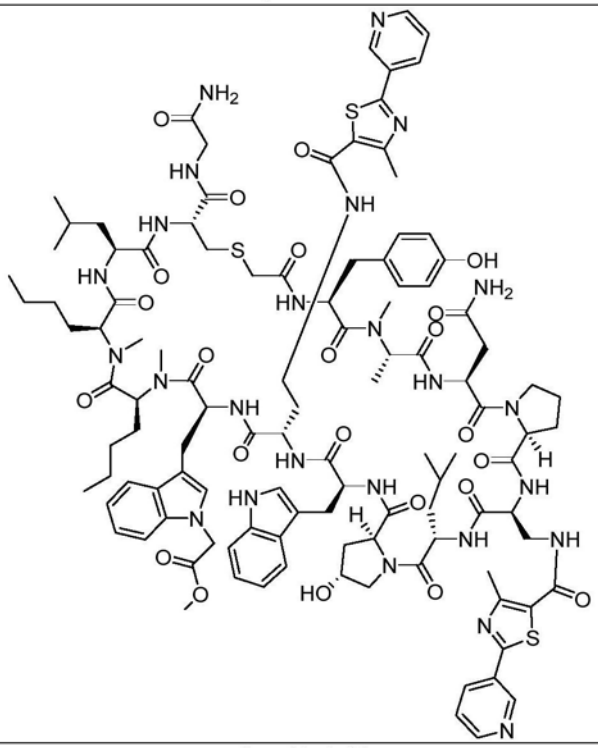


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4-联苯基甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1131 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1131 |
| 保留时间 | 3.41 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 10 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 4 min |
| 流速 | 0.8 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 50x2, 3u |

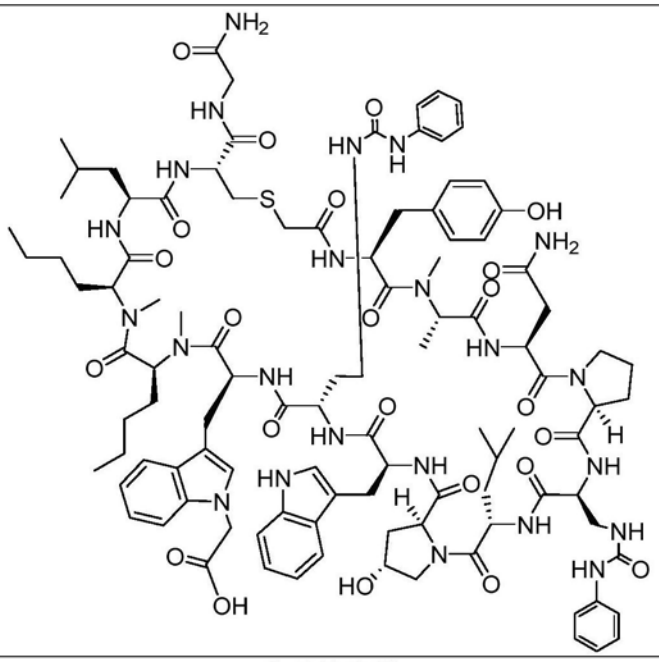
| 化合物1006 |
| --- |
|  |
| **使用的试剂** |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 苯甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1055 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1055 |
| 保留时间 | 2.21 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 : 10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 : 10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 30 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 4 min |
| 流速 | 0.8 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 50x2, 3u |

| 化合物1007 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4-氟-3-(三氟甲基)苯甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1141 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1141 |
| 保留时间 | 2.23 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |

| | |
|---|---|
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

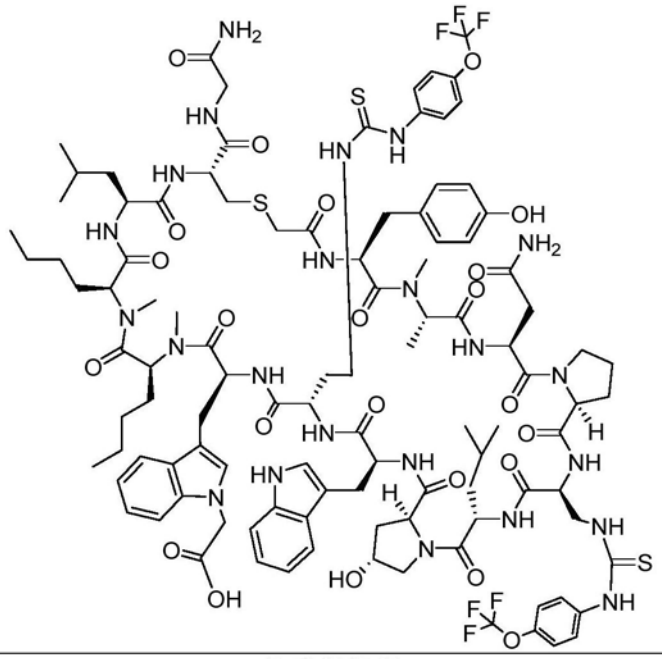
| 化合物1008 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4-甲基-2-(3-吡啶基)-1,3-噻唑-5-甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1153 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1153 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1009 |
|---|



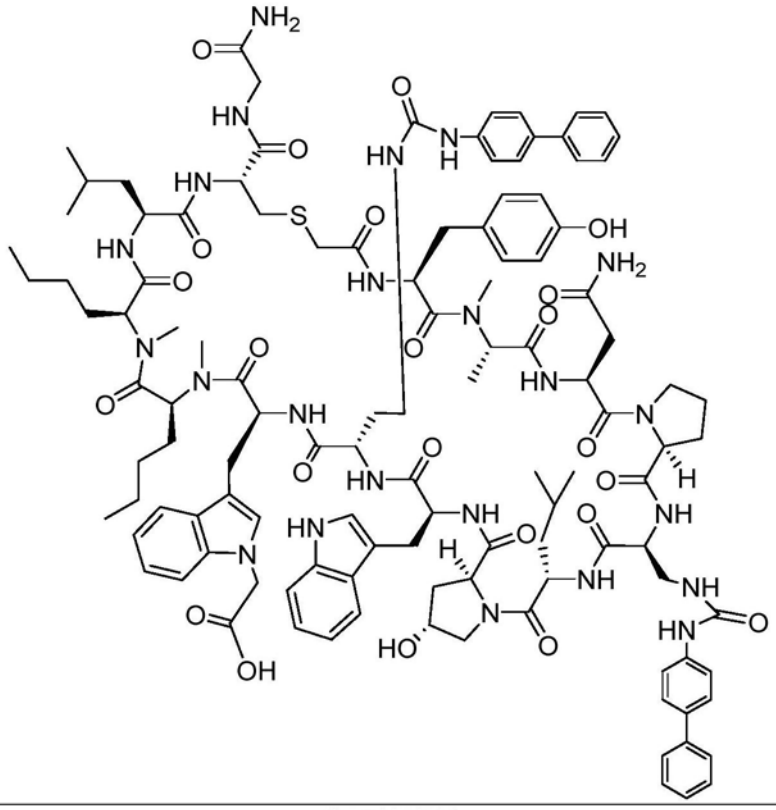
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1063 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1063 |
| 保留时间 | 1.94 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1010 |
|---|



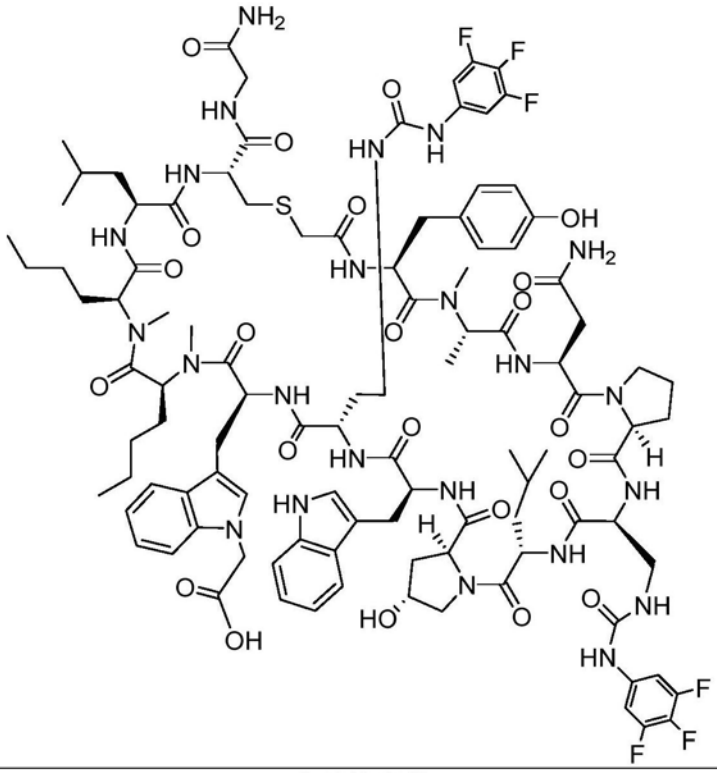
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-4-(三氟甲氧基)苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1163 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1163 |
| 保留时间 | 2.05 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1011 |
|---|



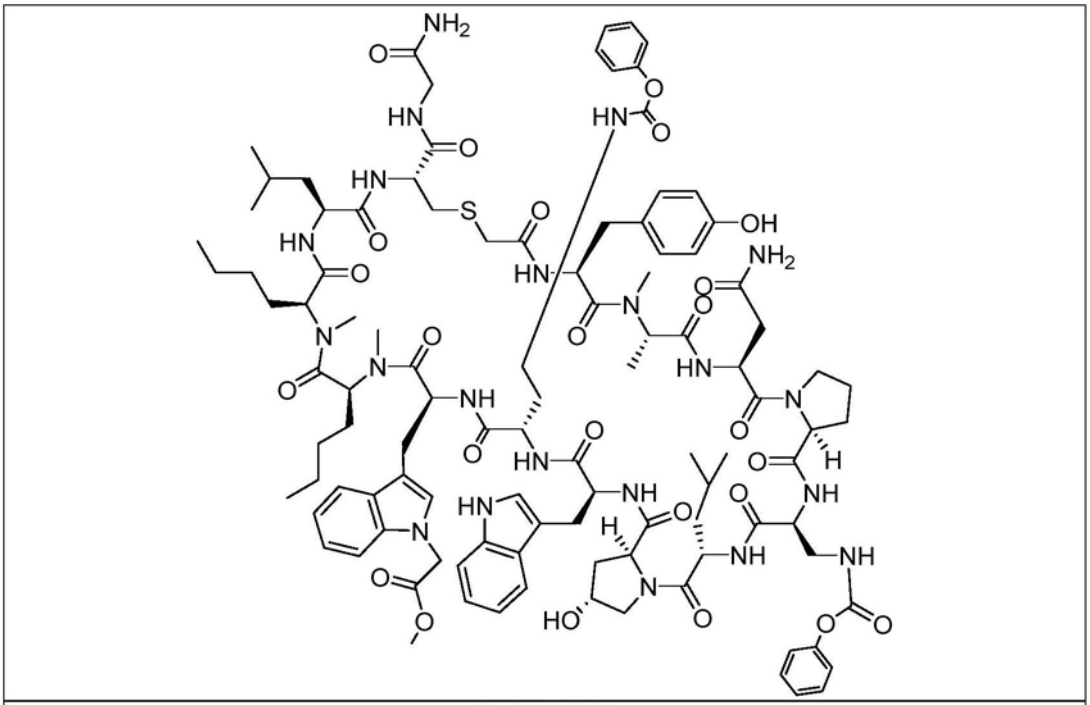
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-异氰酰基-1,1'-联苯基 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1139 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1139 |
| 保留时间 | 1.71 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

| 化合物1012 |
|---|



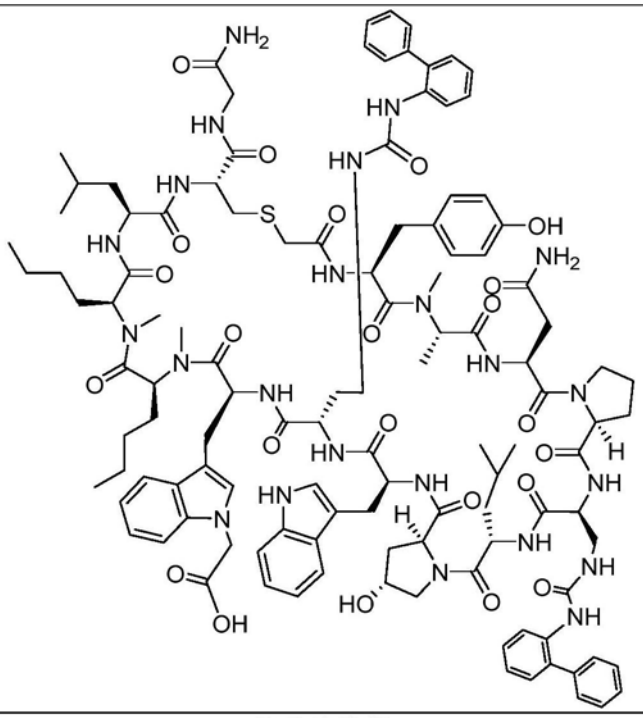
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,2,3-三氟-5-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1117 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1117 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1013 |
|---|



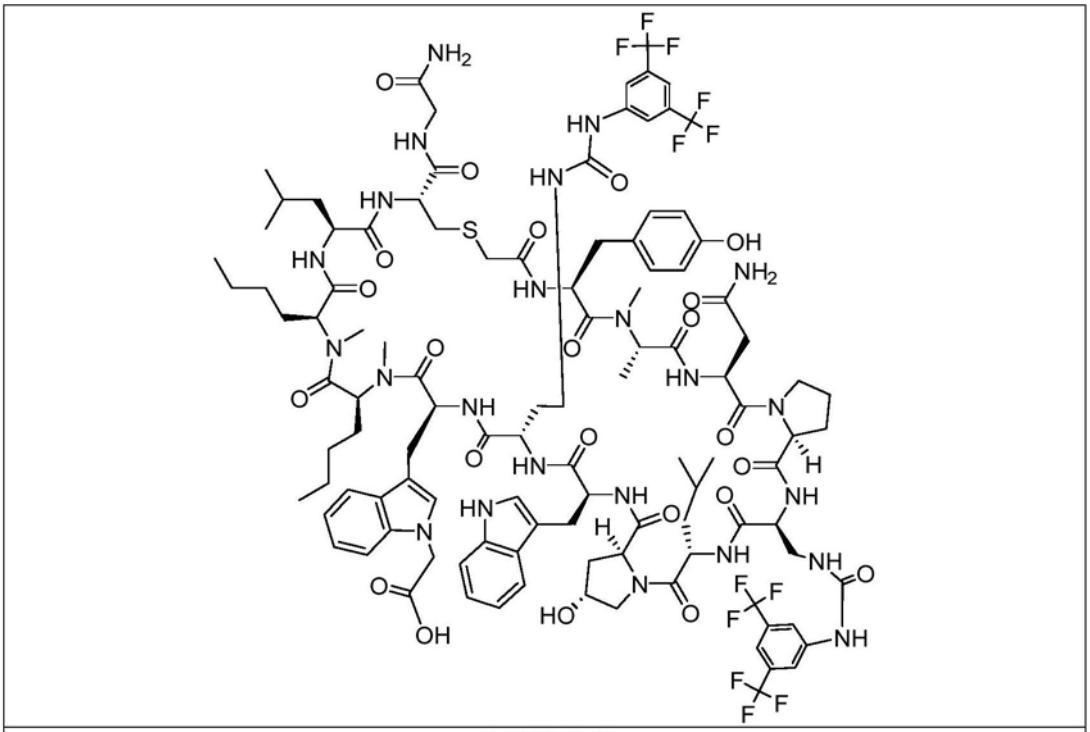
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 氯甲酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1071 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1071 |
| 保留时间 | 2.12 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1014 |
|---|



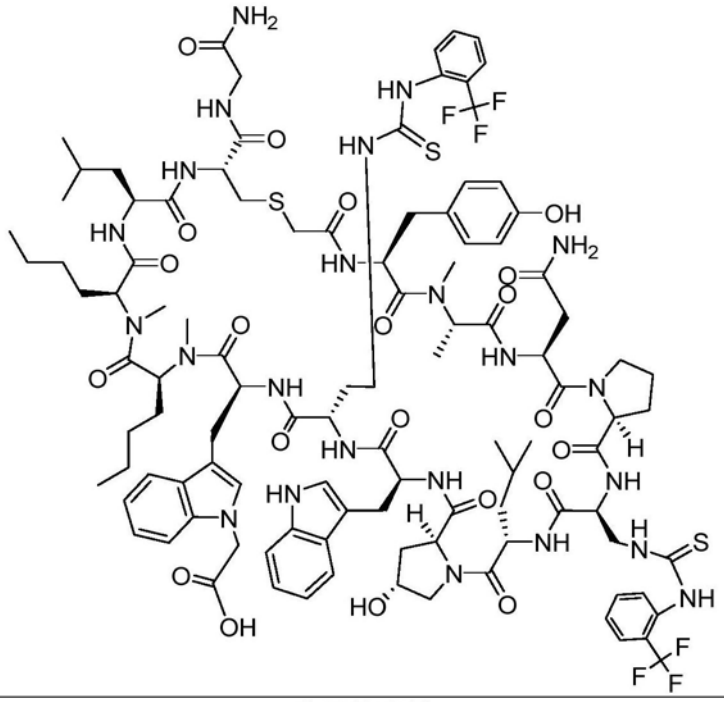
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基-1,1'-联苯基 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1139 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1139 |
| 保留时间 | 1.96 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1015 |
|---|



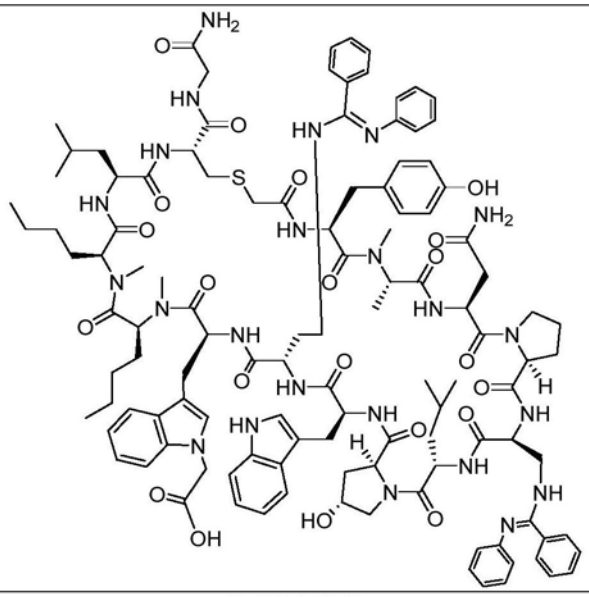
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-3,5-双(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1199 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1199 |
| 保留时间 | 2.24 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1016 |
|---|



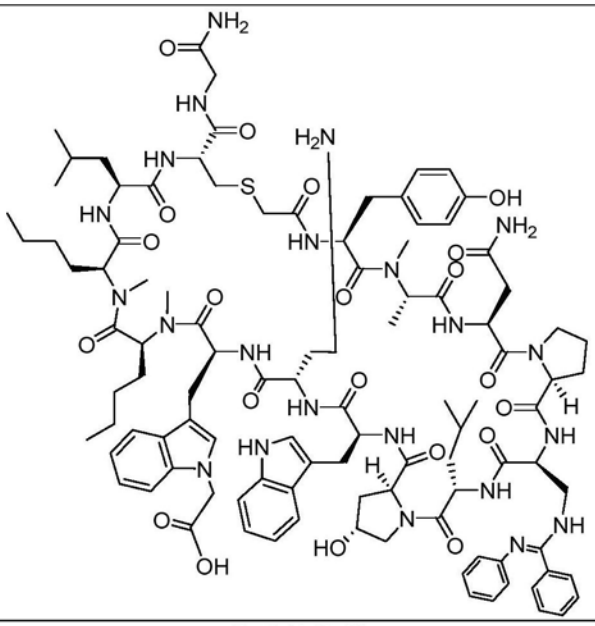
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-2-(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1147 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1147 |
| 保留时间 | 1.84 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1017 |
|---|



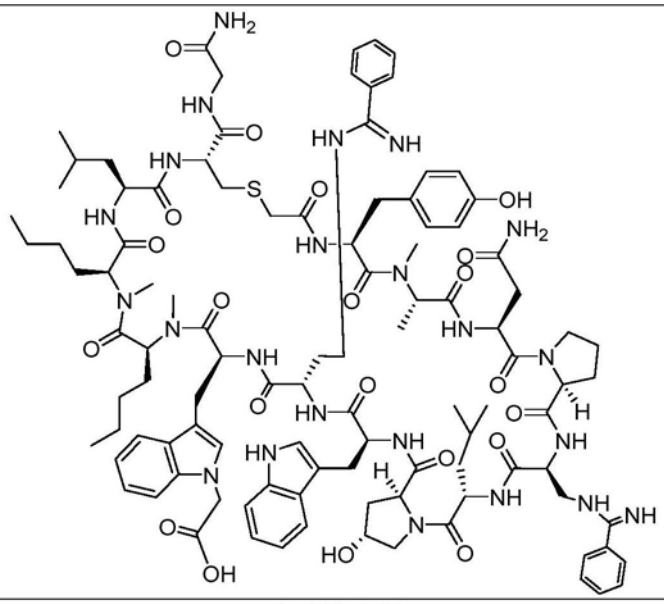
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | (Z)-苯基N-苯基苯甲亚胺酸酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1123 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1123 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1018 |
|---|



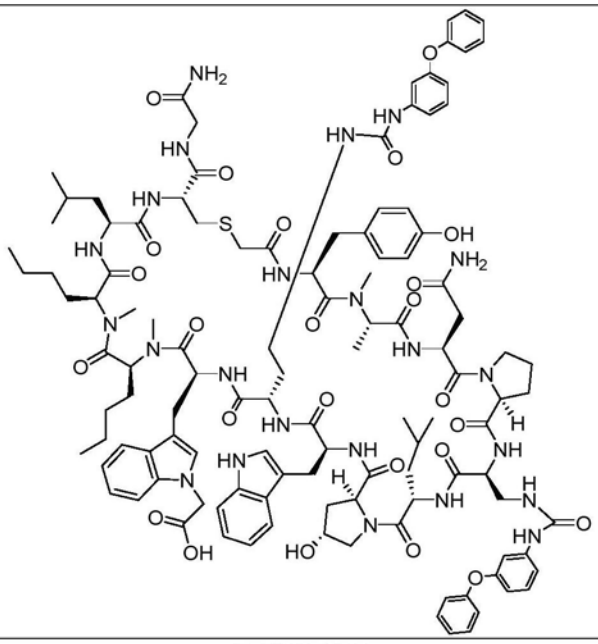
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | (Z)-苯基N-苯基苯甲亚胺酸酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1034 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1034 |
| 保留时间 | 1.75 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1019 |
|---|



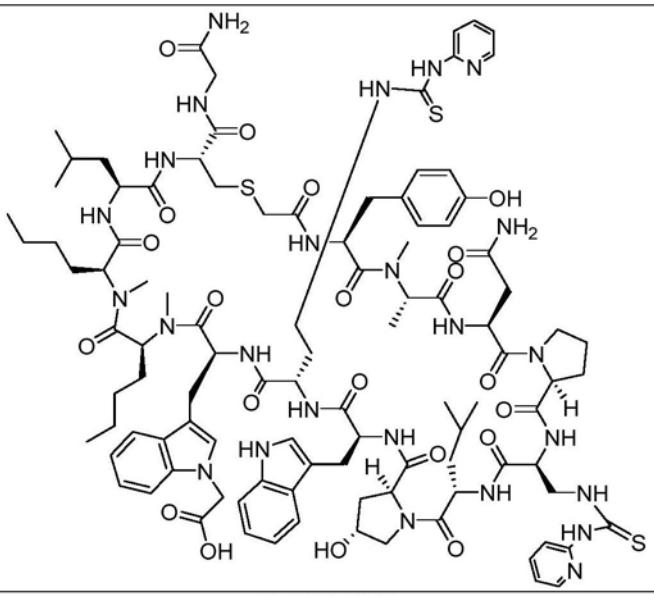
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 苯甲亚胺酸甲酯盐酸盐 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1047 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1047 |
| 保留时间 | 1.65 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1020 |
|---|



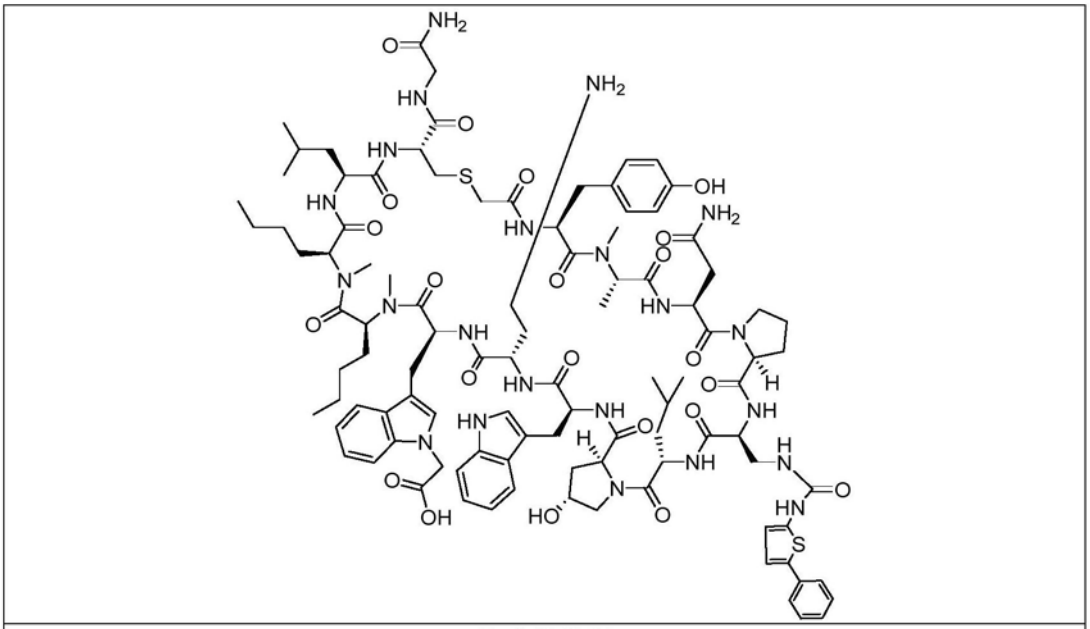
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-3-苯氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1155 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1155 |
| 保留时间 | 2.01 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1021 |
|---|



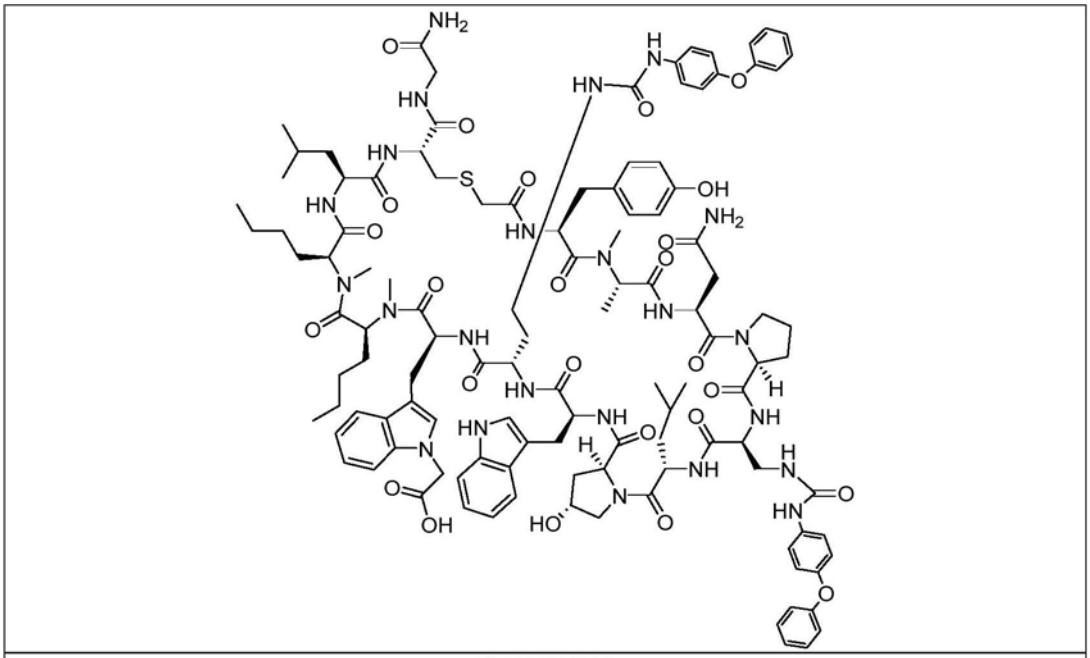
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基吡啶 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1080 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1080 |
| 保留时间 | 1.64 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1022 |
|---|



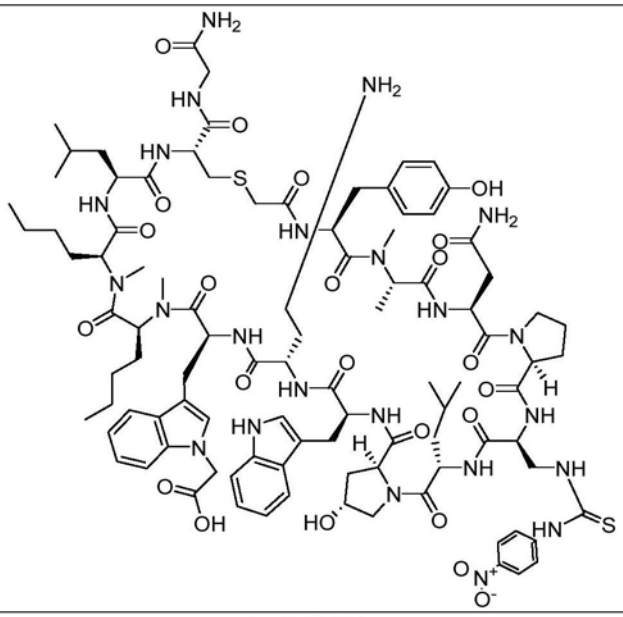
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基-5-苯基噻吩 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1145 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1145 |
| 保留时间 | 1.79 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1023 |
|---|

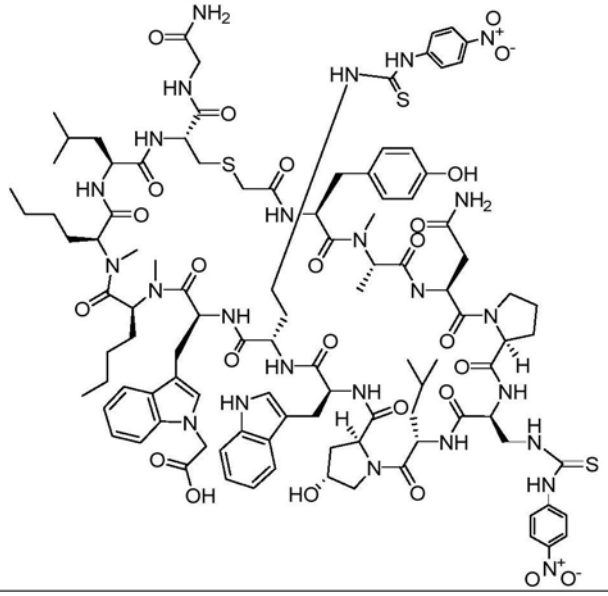


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-4-苯氧基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1155 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1155 |
| 保留时间 | 1.80 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

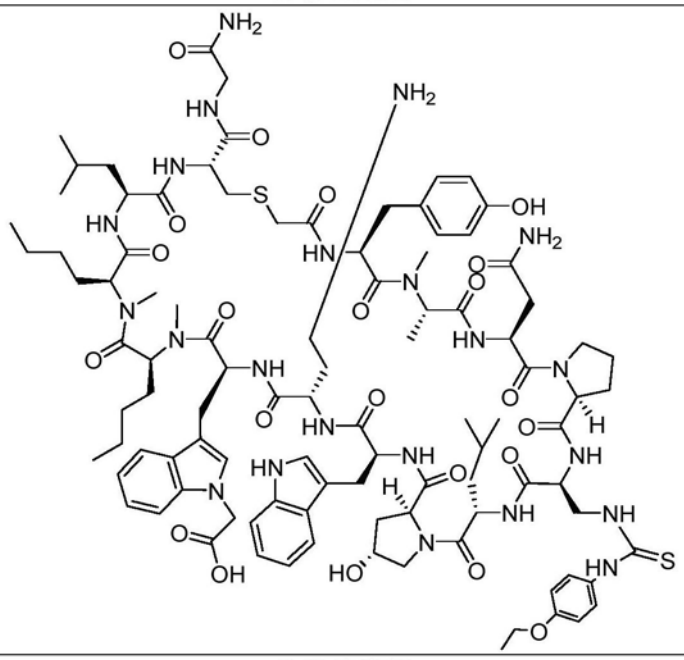
| 化合物1024 |
|---|



| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1034 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1034 |
| 保留时间 | 1.63 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

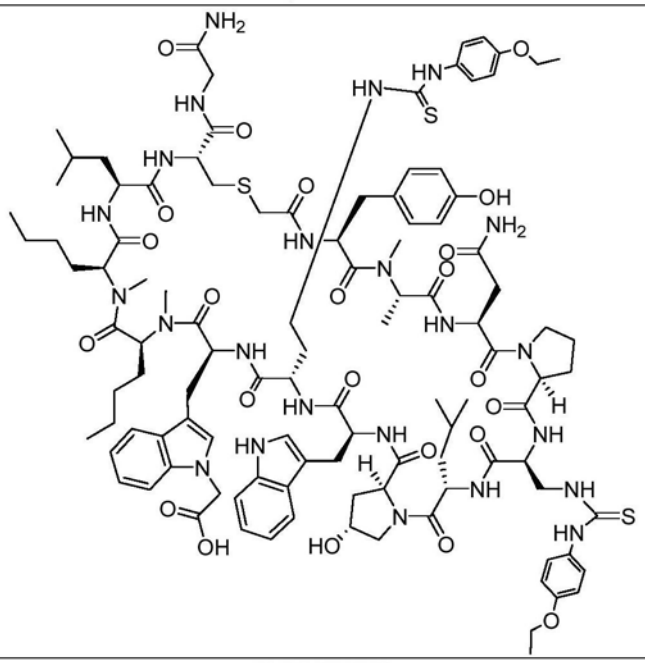
| 化合物1025 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1124 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1124 |
| 保留时间 | 1.88 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

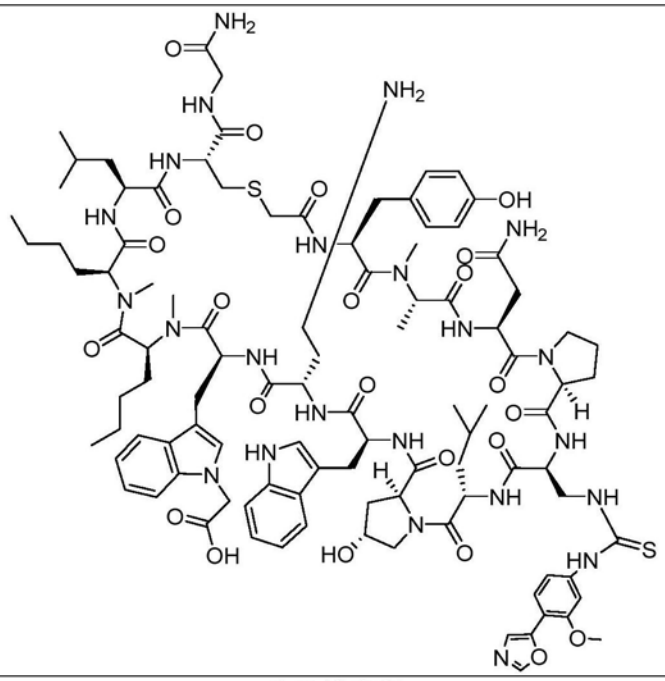
| 化合物1026 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-乙氧基-4-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1034 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1034 |
| 保留时间 | 1.58 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |

| | |
| --- | --- |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

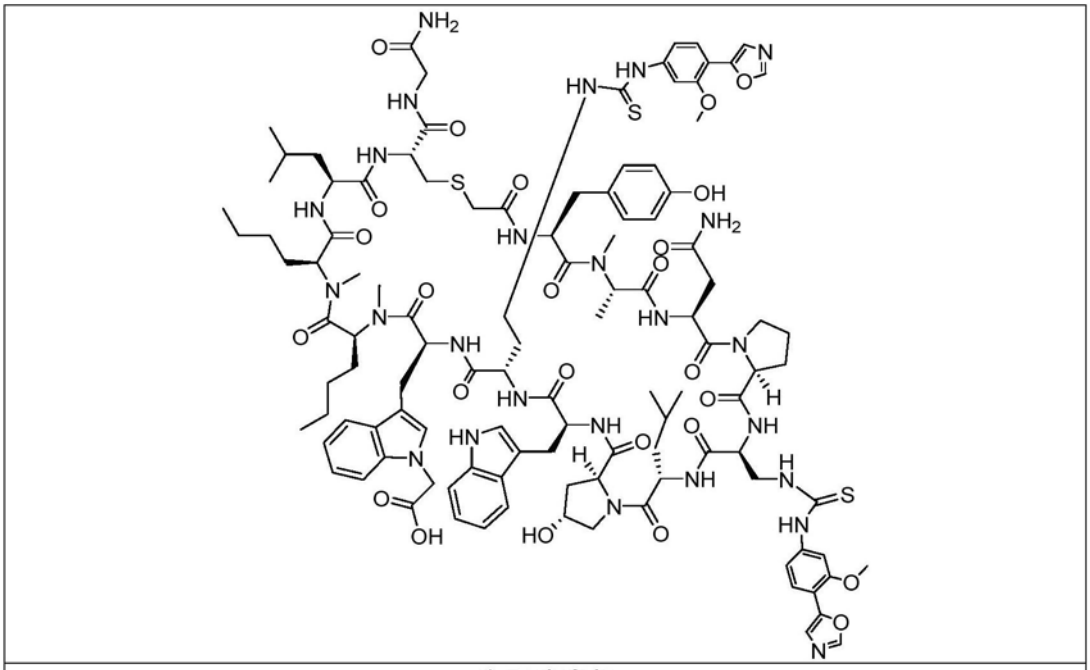
| 化合物1027 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-乙氧基-4-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1123 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1123 |
| 保留时间 | 1.84 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1028 |
|---|



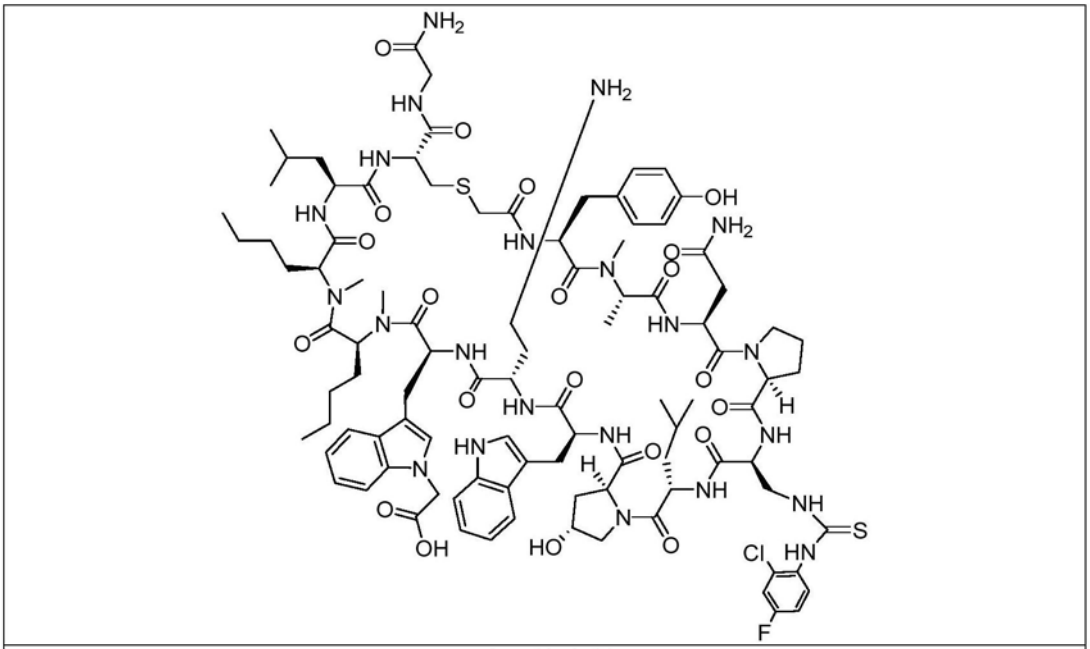
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-(4-异硫氰酰基-2-甲氧基苯基)噁唑 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1060 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1060 |
| 保留时间 | 1.88 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

| 化合物1029 |
|---|

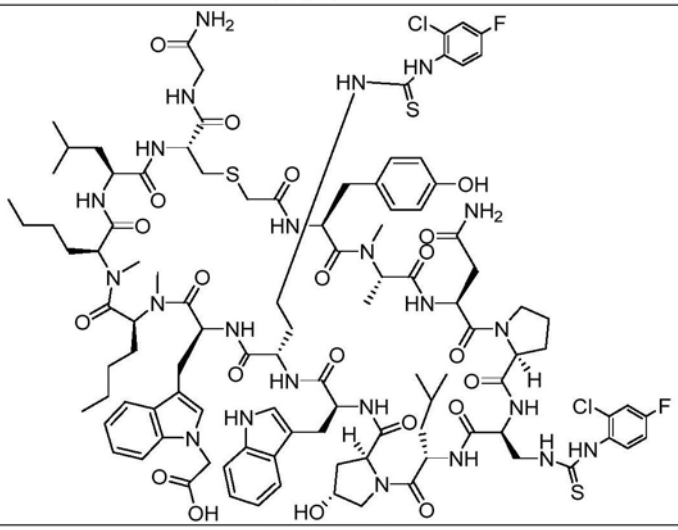


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-(4-异硫氰酰基-2-甲氧基苯基)噁唑 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1176 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1176 |
| 保留时间 | 1.87 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

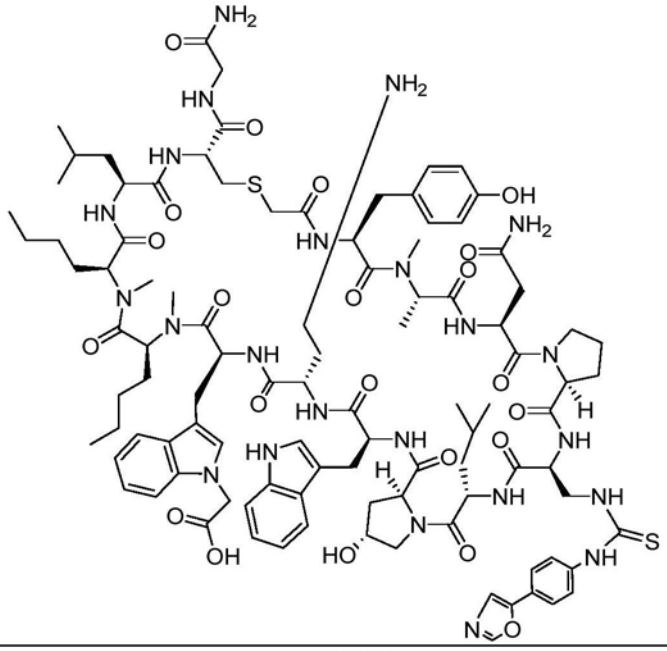
| 化合物1030 |
|---|



| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-氯-4-氟-1-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1038 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1038 |
| 保留时间 | 1.96 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

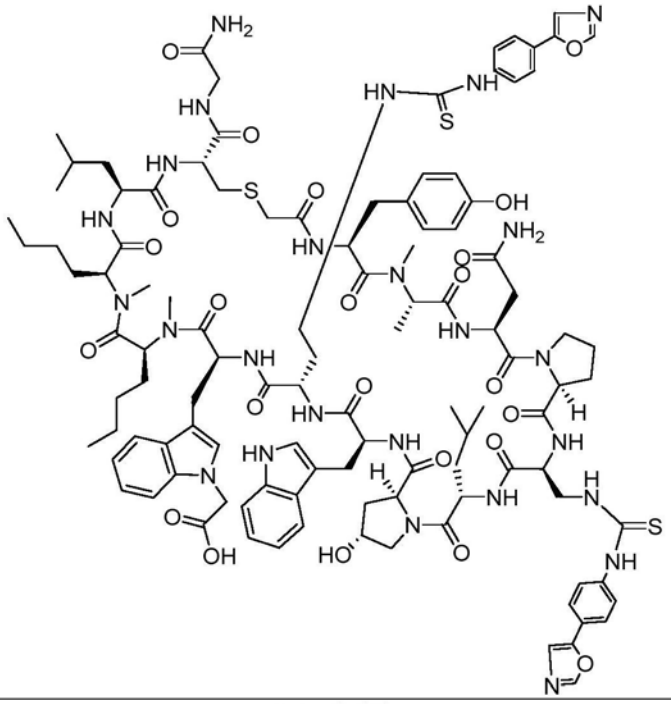
| 化合物1031 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-氯-4-氟-1-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1131 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1131 |
| 保留时间 | 1.98 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

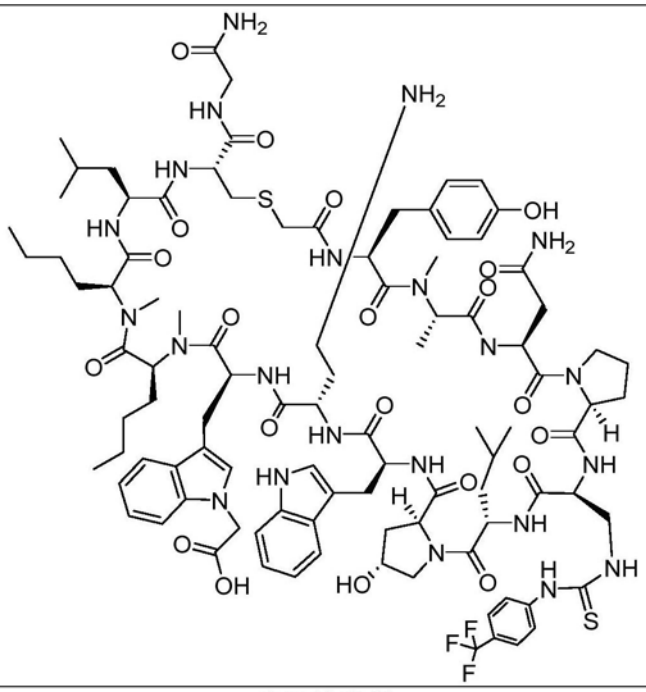
| 化合物1032 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-(4-异硫氰酰基苯基)噁唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1045 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1045 |
| 保留时间 | 1.63 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |

| | |
| --- | --- |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

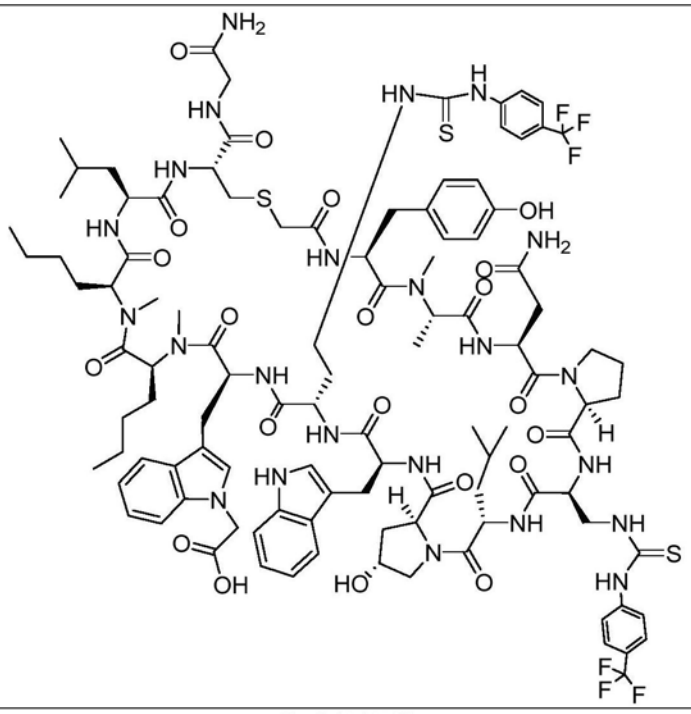
| 化合物1033 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-(4-异硫氰酰基苯基)噁唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1046 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1046 |
| 保留时间 | 1.63 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1034 |
|---|



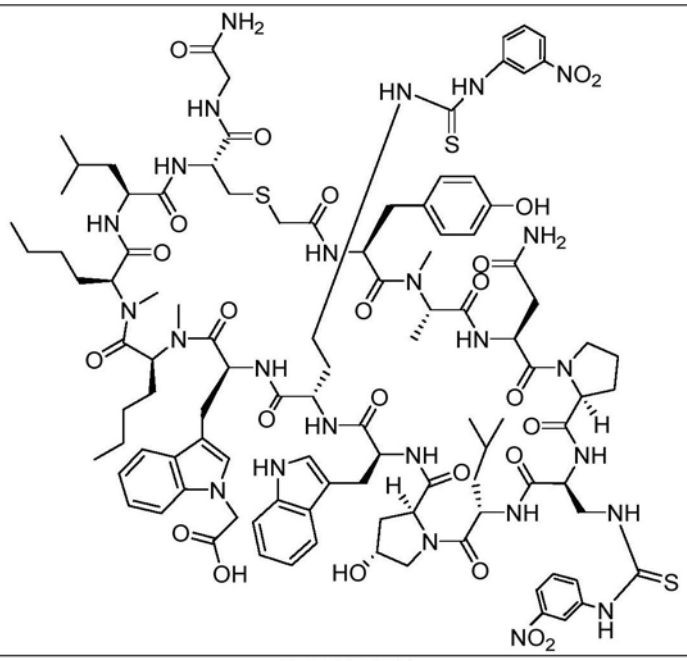
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-4-(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1046 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1046 |
| 保留时间 | 1.89 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1035 |
|---|



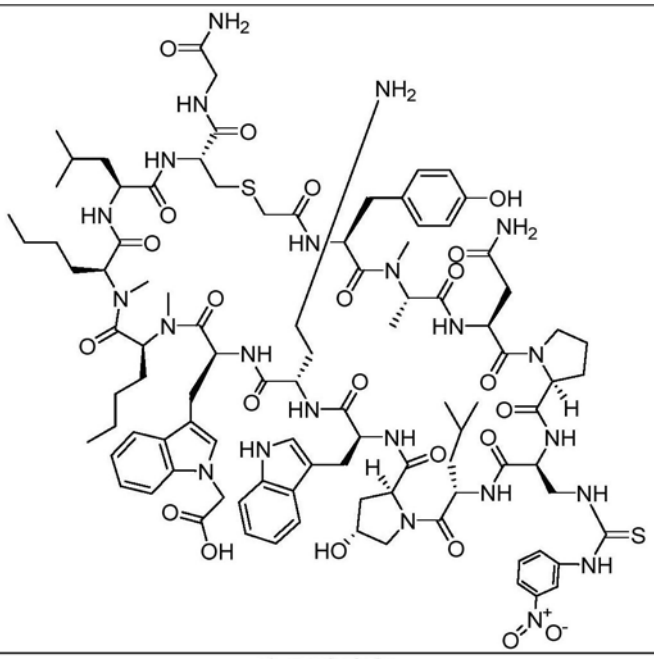
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-4-(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1147 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1147 |
| 保留时间 | 2.07 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1036 |
|---|



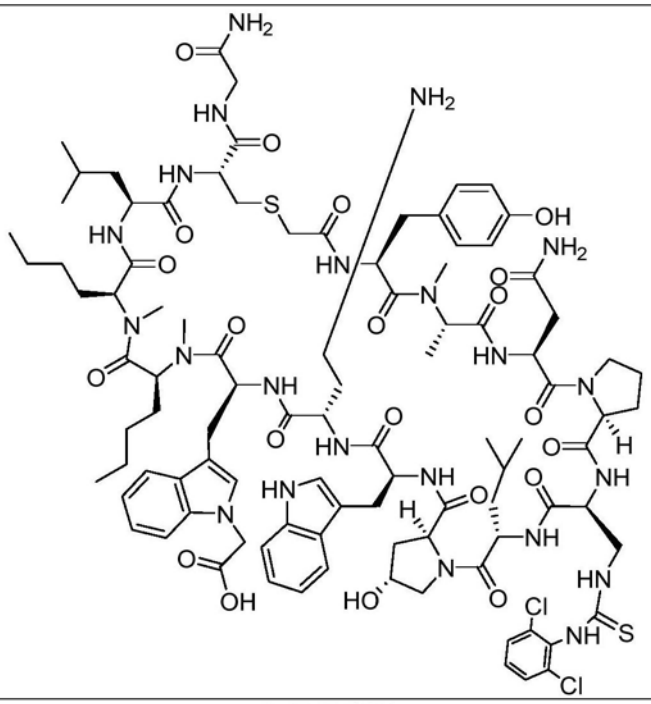
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-3-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1124 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1124 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1037 |
|---|



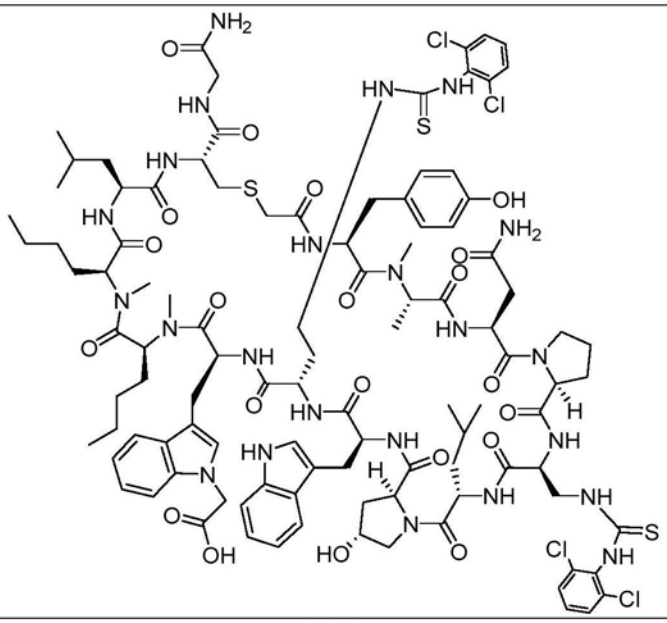
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-3-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1034 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1034 |
| 保留时间 | 1.79 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1038 |
|---|



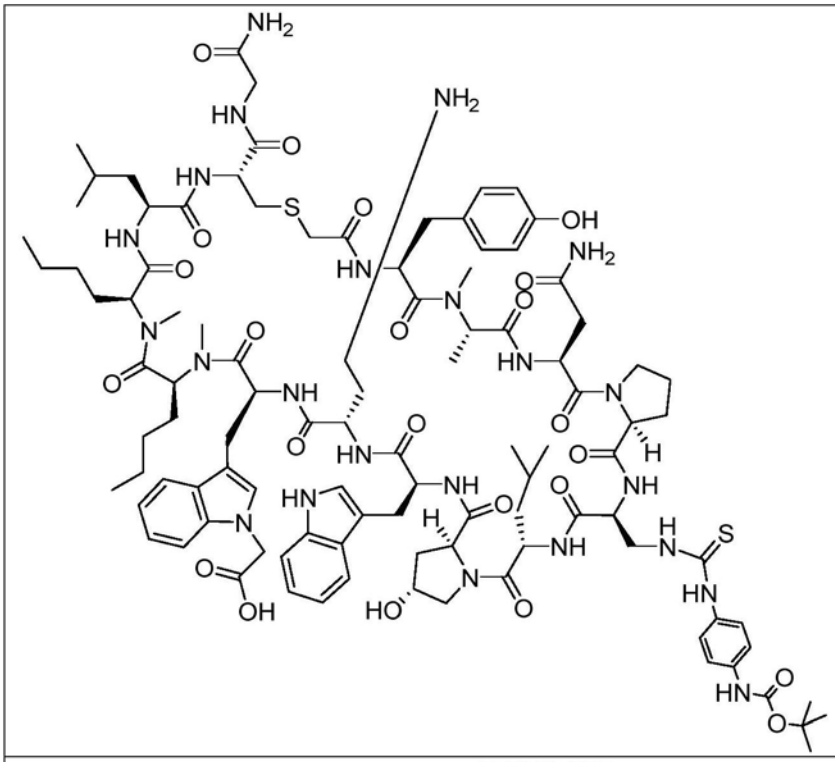
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3-二氯-2-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1045 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1045 |
| 保留时间 | 1.78 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1039 |
|---|



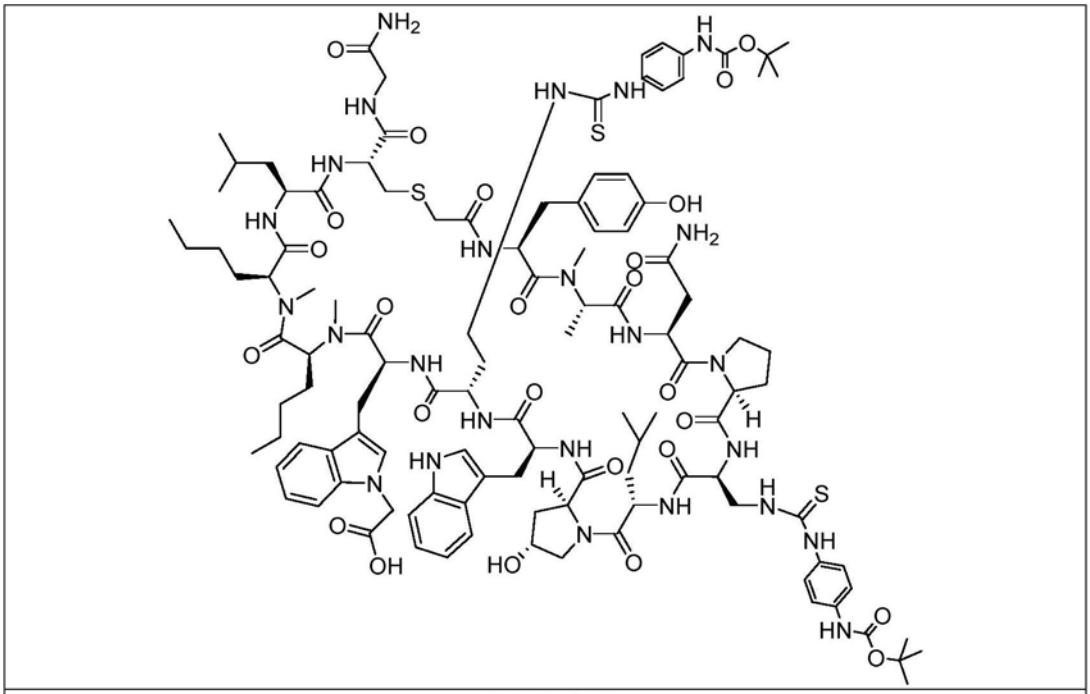
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3-二氯-2-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1147 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1147 |
| 保留时间 | 1.91 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

**化合物1040**



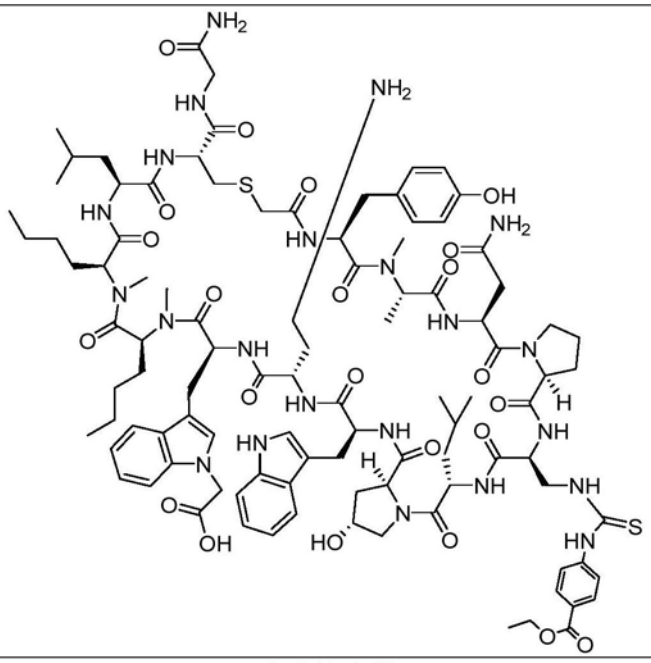
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | (4-异硫氰酰基苯基)氨基甲酸叔丁酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1069 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1069 |
| 保留时间 | 1.99 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm |

| 化合物1041 |
|---|



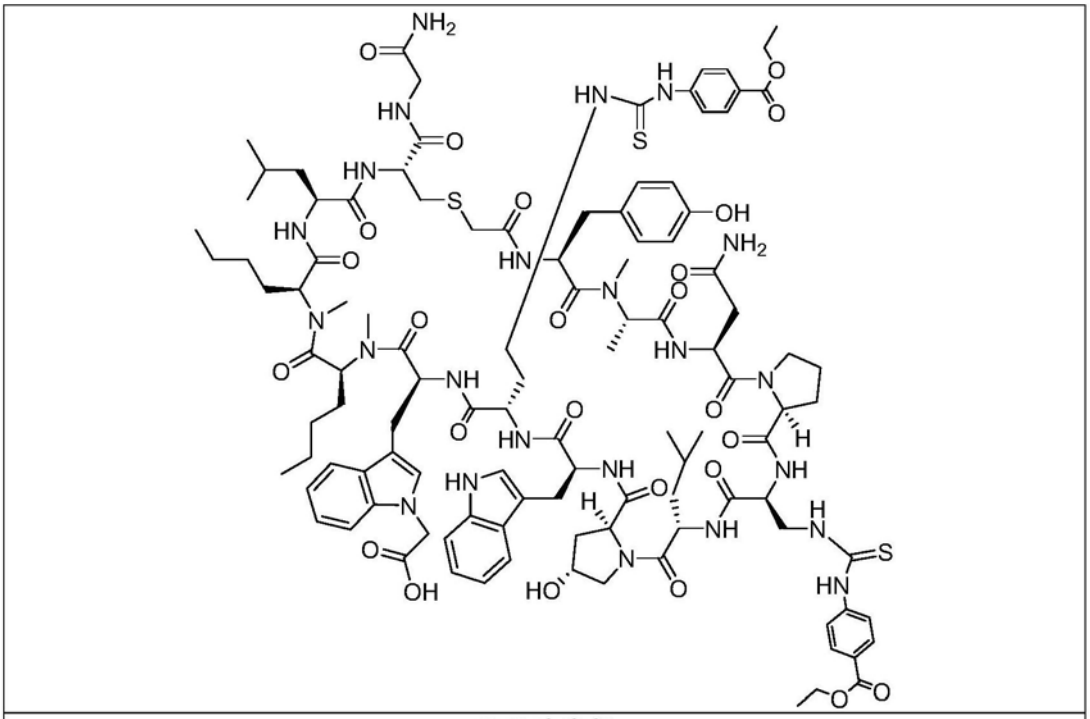
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | (4-异硫氰酰基苯基)氨基甲酸叔丁酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1194 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1194 |
| 保留时间 | 2.08 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

| 化合物1042 |
|---|



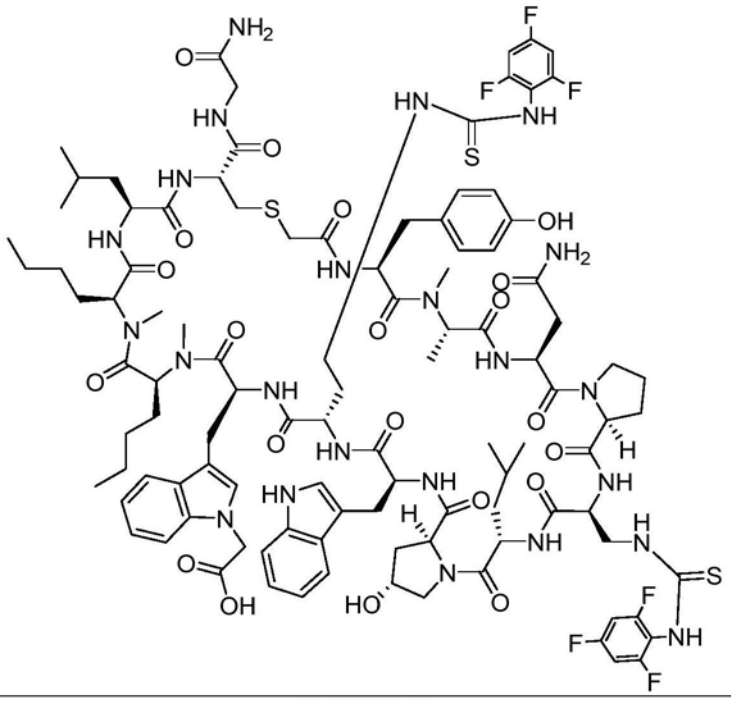
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-异硫氰酰基苯甲酸乙酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1047 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1047 |
| 保留时间 | 1.98 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

| 化合物1043 |
|---|



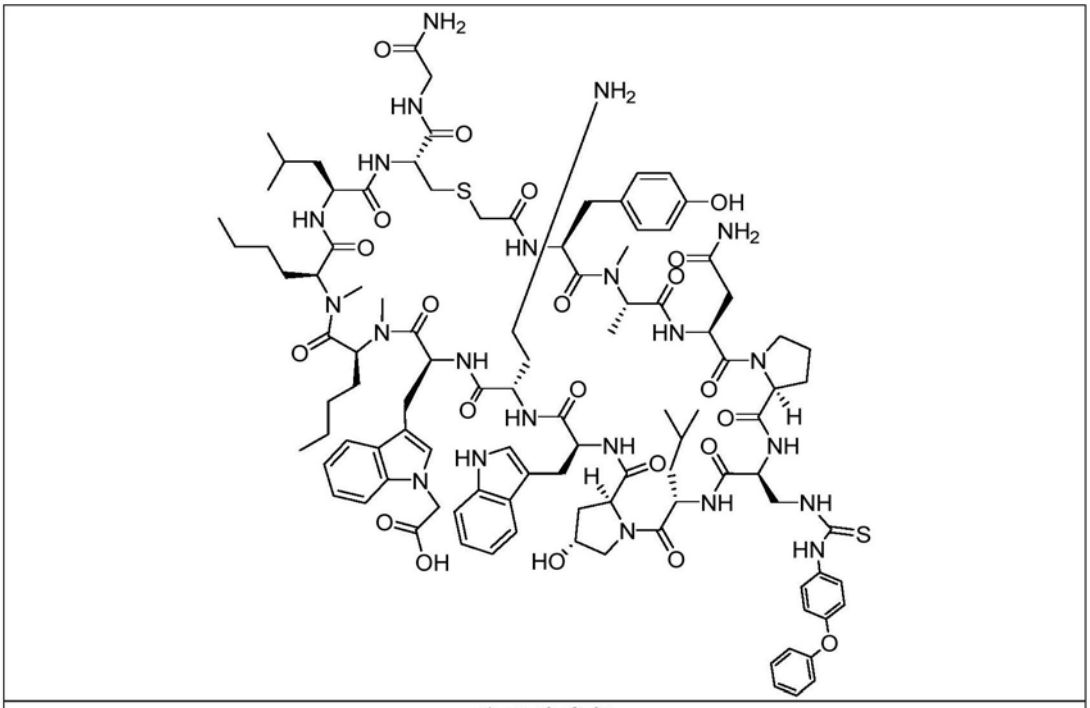
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-异硫氰酰基苯甲酸乙酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1151 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1151 |
| 保留时间 | 1.98 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

| 化合物1044 |
|---|



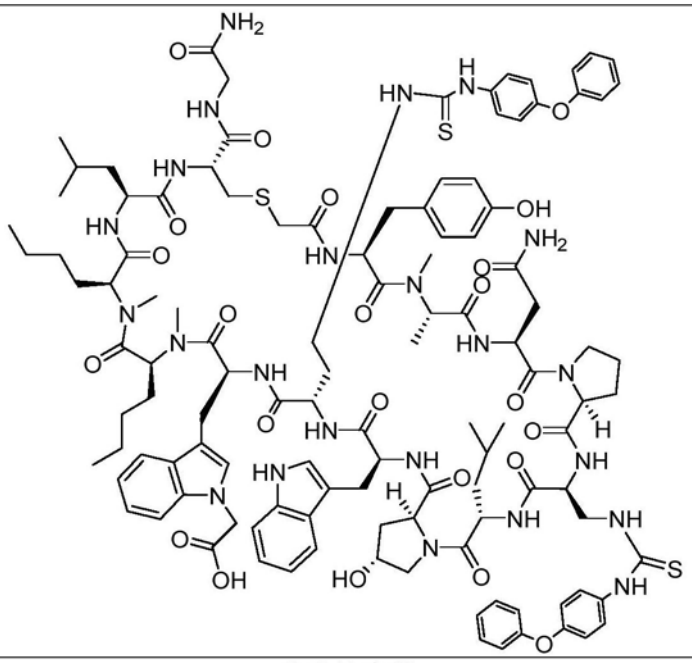
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3,5-三氟-2-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1133 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1133 |
| 保留时间 | 1.94 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

| 化合物1045 |
|---|



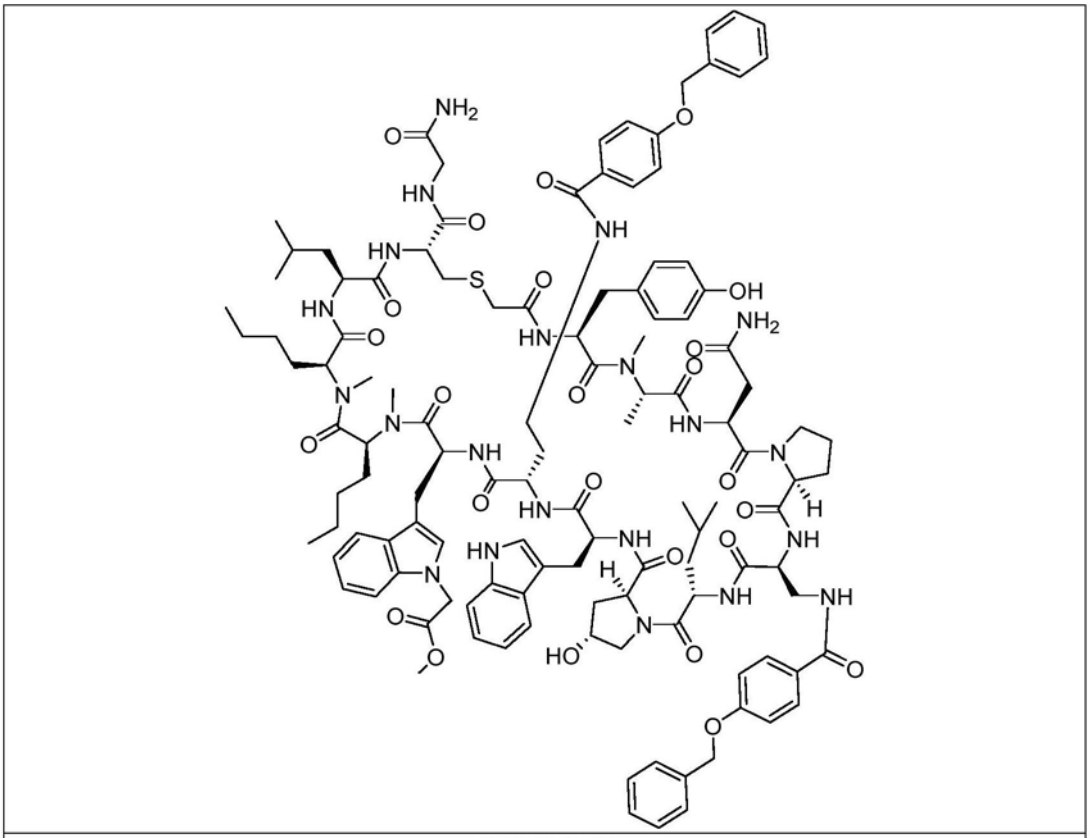
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-4-苯氧基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1058 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1058 |
| 保留时间 | 1.65 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

| 化合物1046 |
|---|



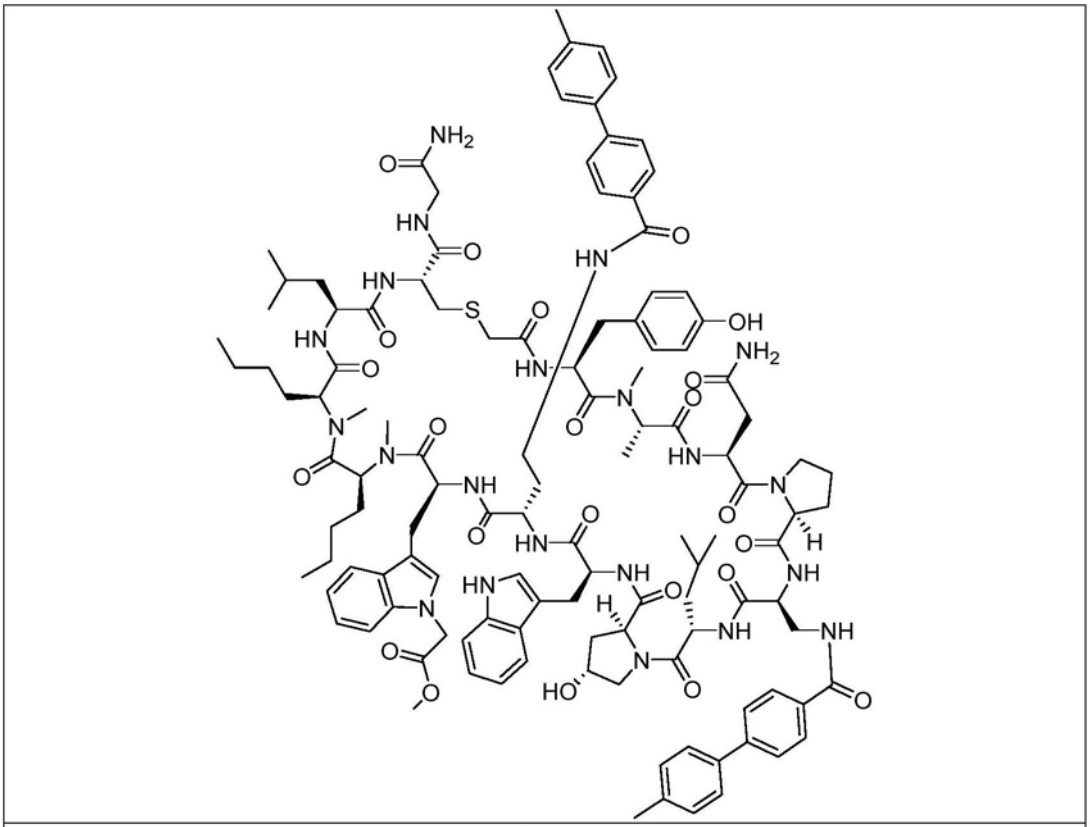
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-4-苯氧基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1171 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1171 |
| 保留时间 | 2.22 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm |

| 化合物1047 |
|---|



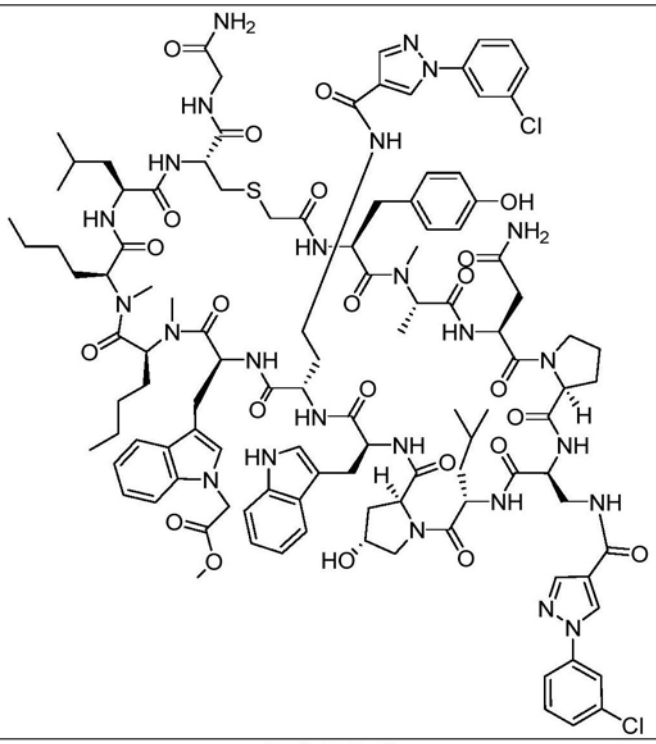
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4-苄氧基苯甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1161 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1161 |
| 保留时间 | 2.36 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1048 |
|---|



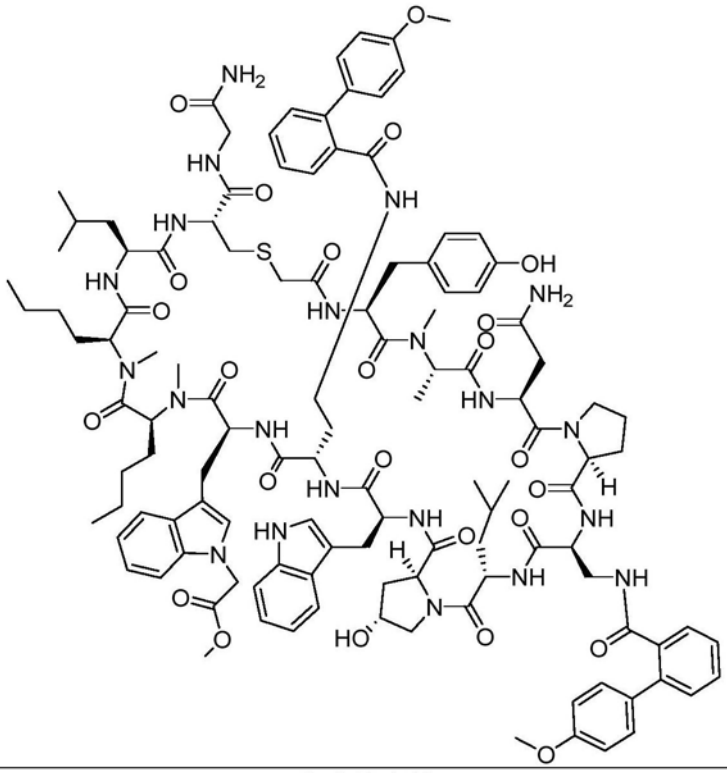
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4'-甲基联苯基-4-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1145 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1145 |
| 保留时间 | 2.46 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1049 |
|---|



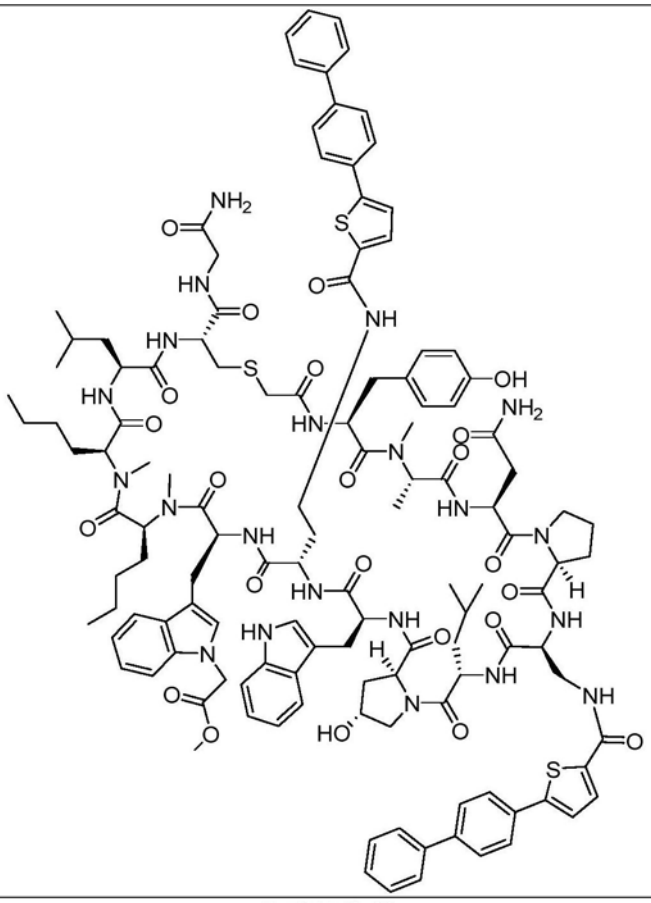
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 1-(3-氯苯基)-1H-吡唑-4-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1155 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1156 |
| 保留时间 | 2.28 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1050 |
|---|



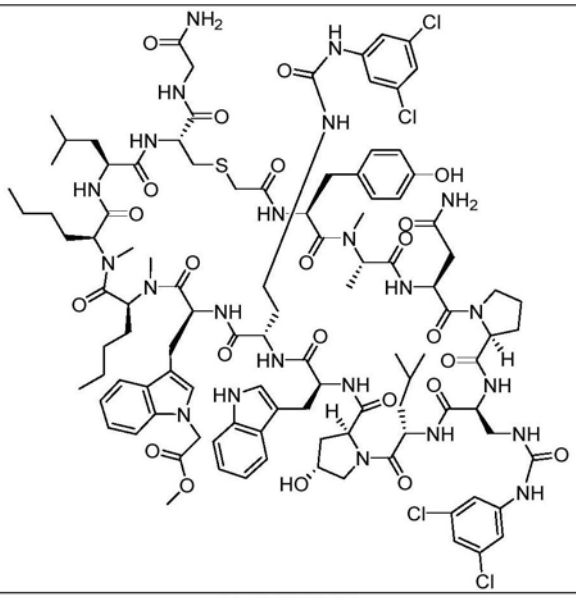
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4'-甲氧基-联苯基-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1161 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1161 |
| 保留时间 | 2.52 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1051 |
|---|



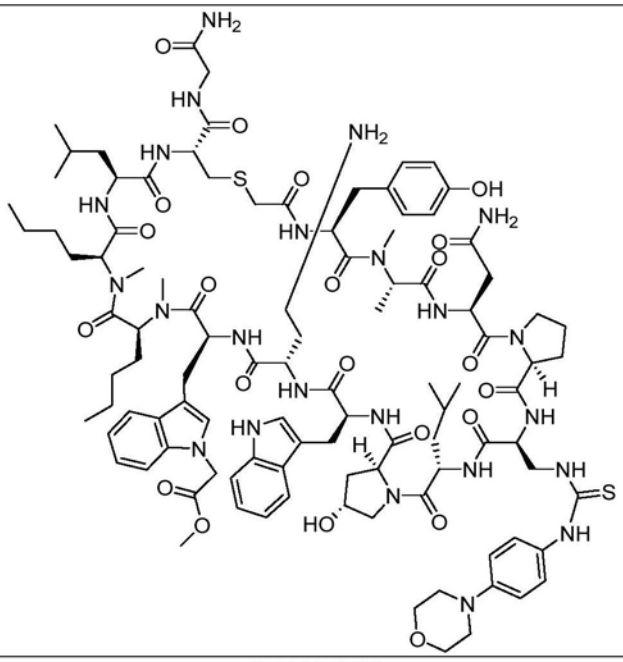
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 5-(1,1'-联苯基-4-基)噻吩-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1213 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1213 |
| 保留时间 | 2.93 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1052 |
|---|

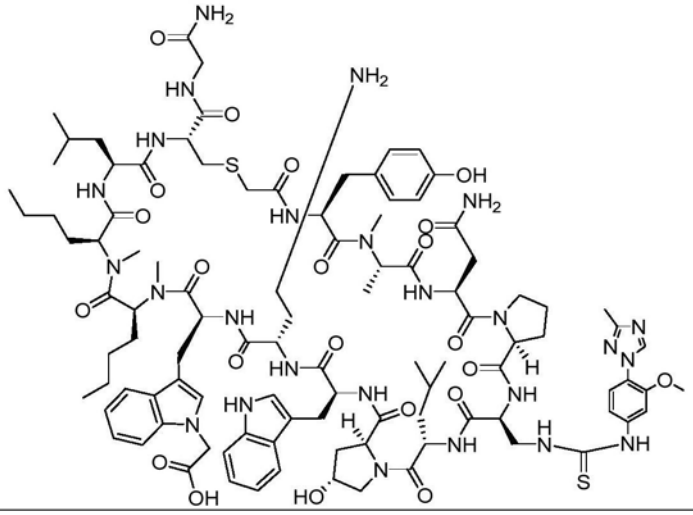


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 3,5-二氯苯基异氰酸酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1138 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1138 |
| 保留时间 | 2.44 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

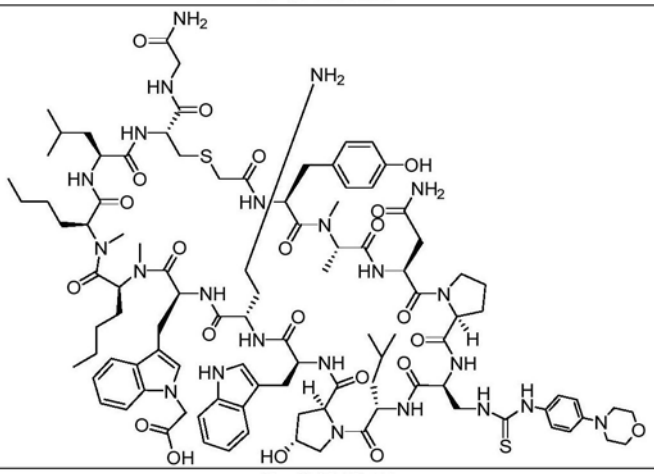
| 化合物1053 |
|---|

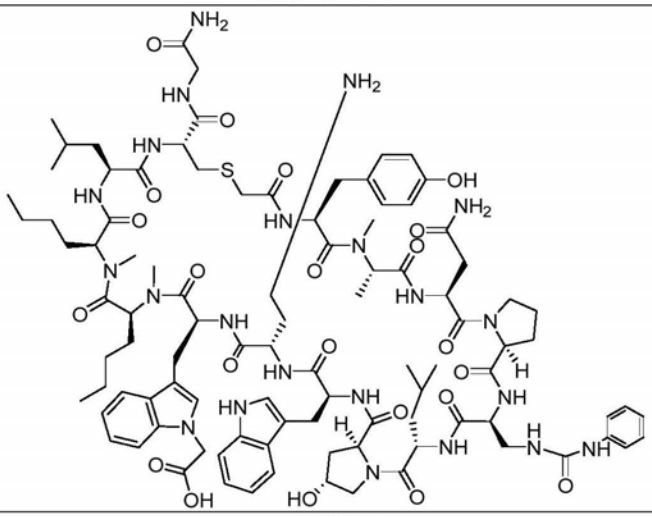


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4-吗啉代苯基异硫氰酸酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1061 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1061 |
| 保留时间 | 1.99 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

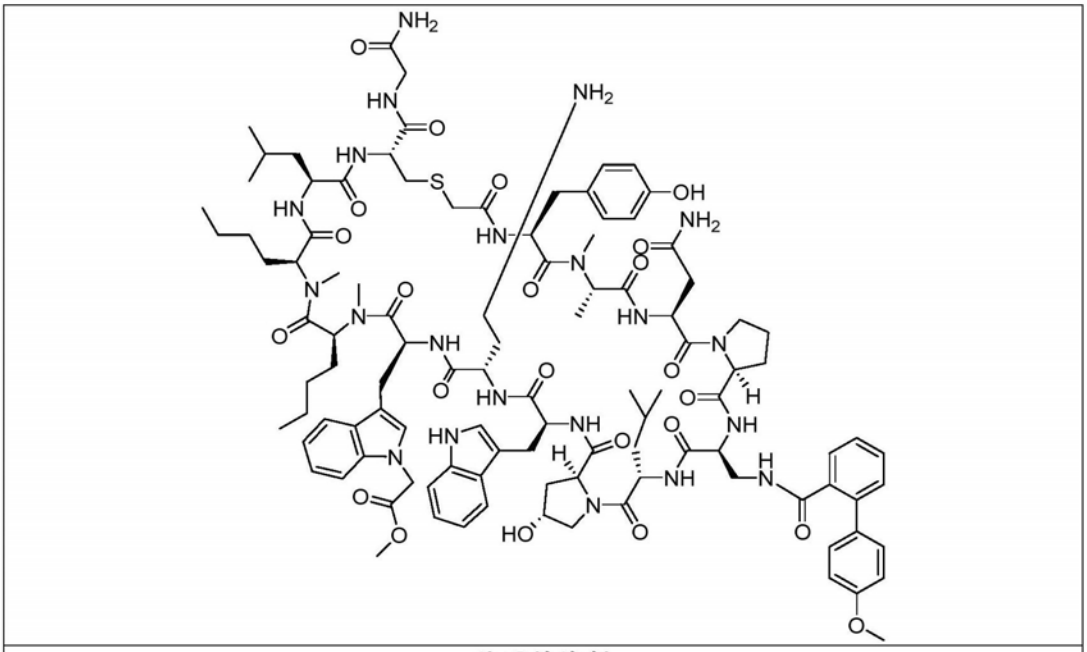
| 化合物1054 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-(4-异硫氰酰基-2-甲氧基苯基)-3-甲基-1H-1,2,4-三唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1067 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1067 |
| 保留时间 | 1.63 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1055 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-(4-异硫氰酰基苯基)吗啉 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1054 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1054 |
| 保留时间 | 1.66 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

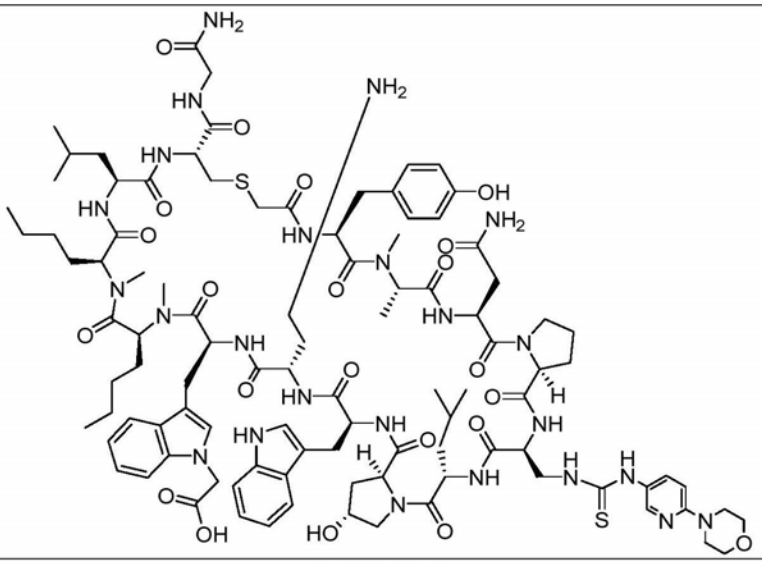
| 化合物1056 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1003 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1003 |
| 保留时间 | 1.66 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1057 |
|---|

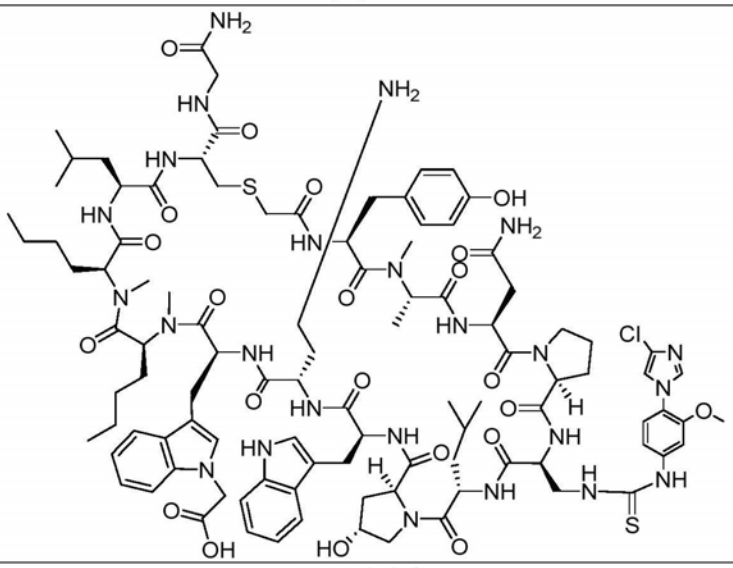


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4'-甲氧基-[1,1'-联苯基]-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1056 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1056 |
| 保留时间 | 1.96 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

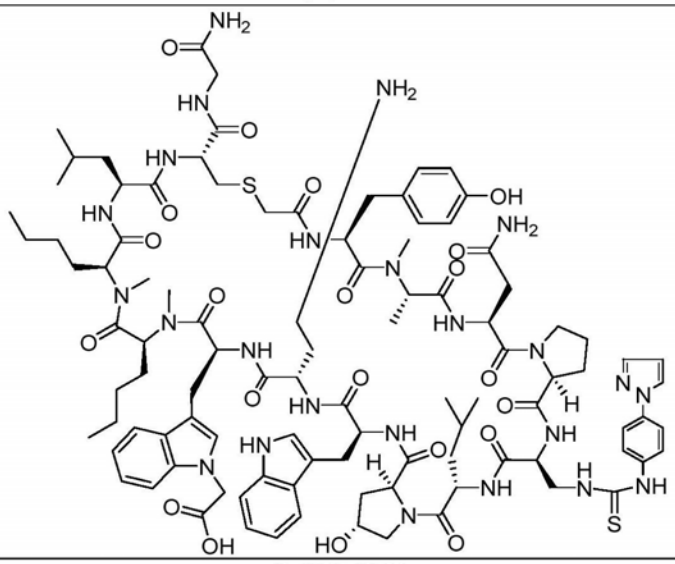
| 化合物1058 |
|---|



| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-(5-异硫氰酰基吡啶-2-基)吗啉 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1055 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1055 |
| 保留时间 | 1.64 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

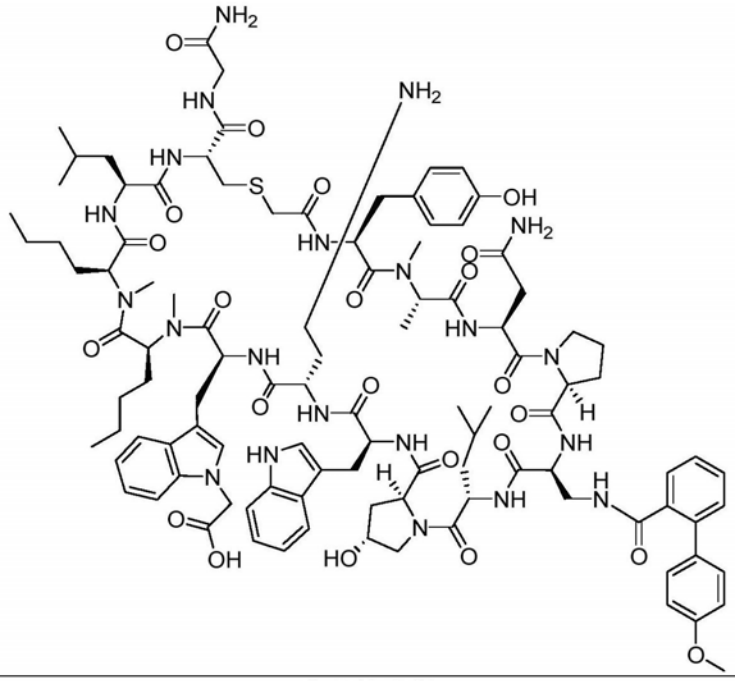
| 化合物1059 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-氯-1-(4-异硫氰酰基-2-甲氧基苯基)-1H-咪唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1076 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1076 |
| 保留时间 | 1.63 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

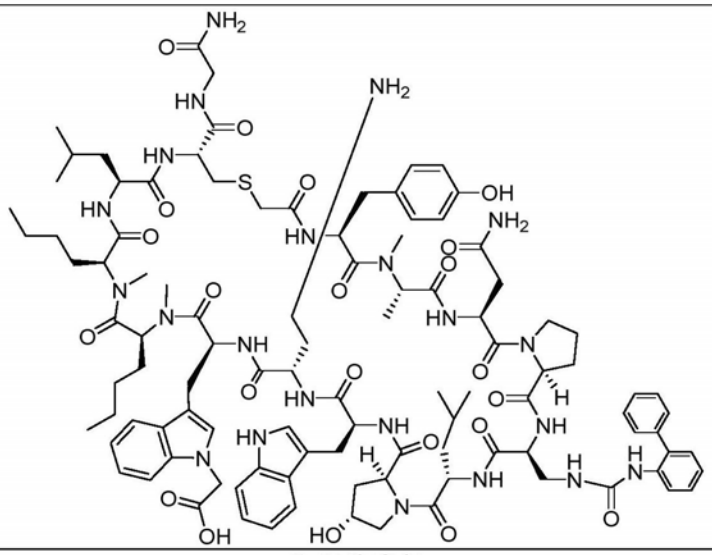
| 化合物1060 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-(4-异硫氰酰基苯基)-1H-吡唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1044 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1044 |
| 保留时间 | 1.69 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |

| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |
| --- | --- |

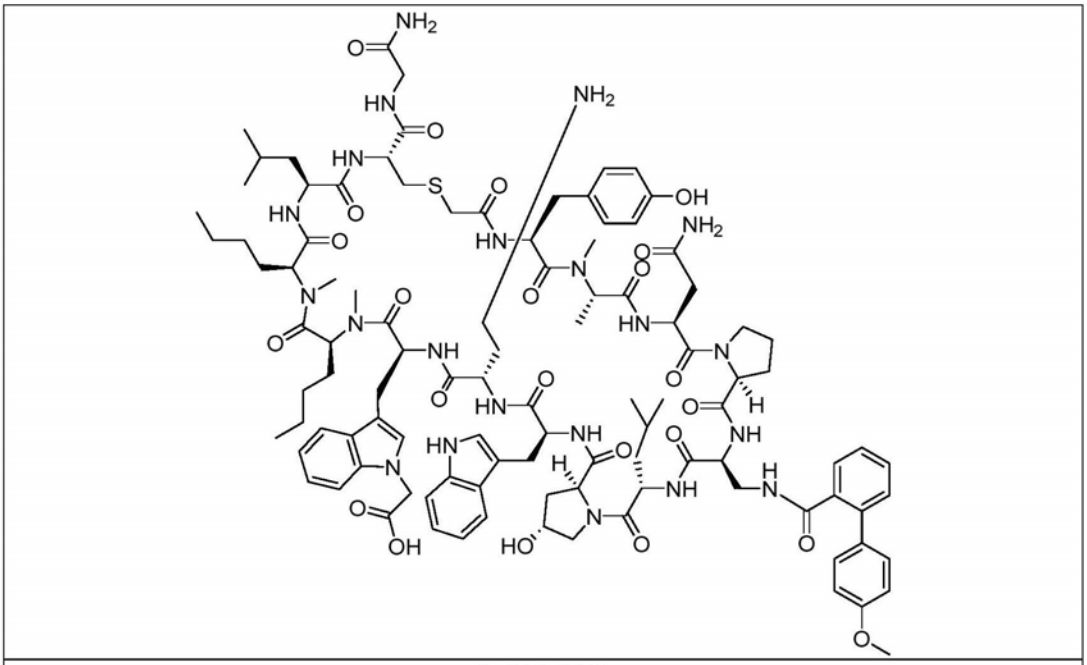
| 化合物1061 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4'-甲氧基-[1,1'-联苯基]-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1049 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1049 |
| 保留时间 | 1.74 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1062 |
|---|



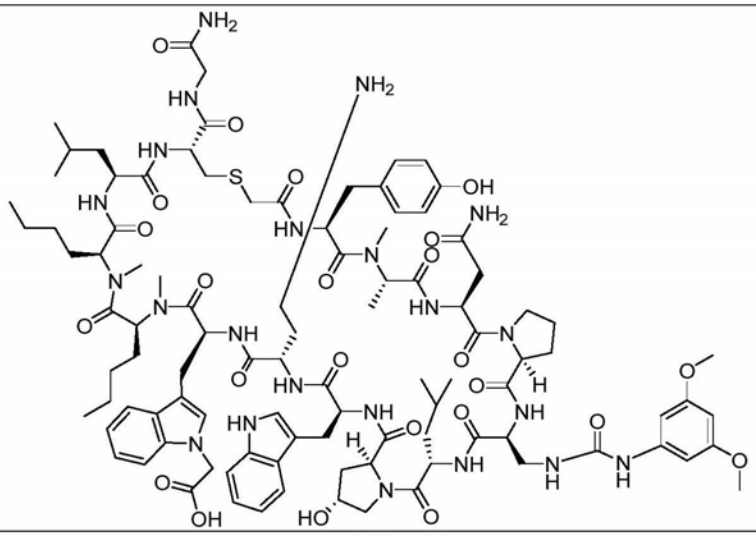
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基-1,1'-联苯基 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1042 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1042 |
| 保留时间 | 1.80 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1063 |
|---|

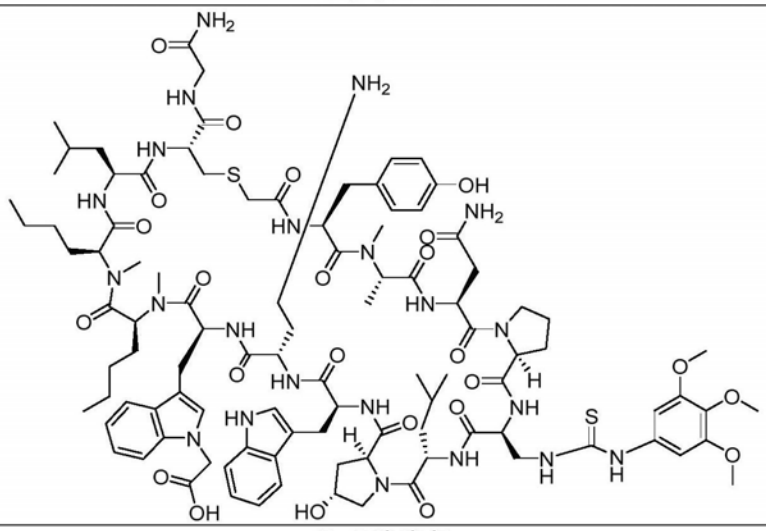


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4'-甲氧基-[1,1'-联苯基]-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1049 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1049 |
| 保留时间 | 1.78 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1064 |
|---|

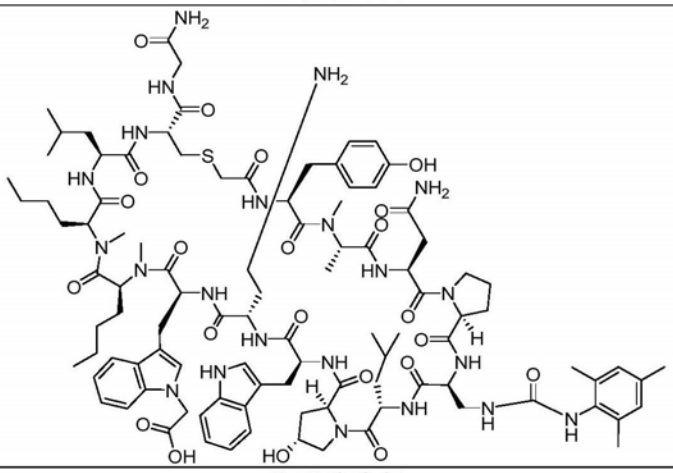


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-3,5-二甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1034 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1034 |
| 保留时间 | 1.67 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

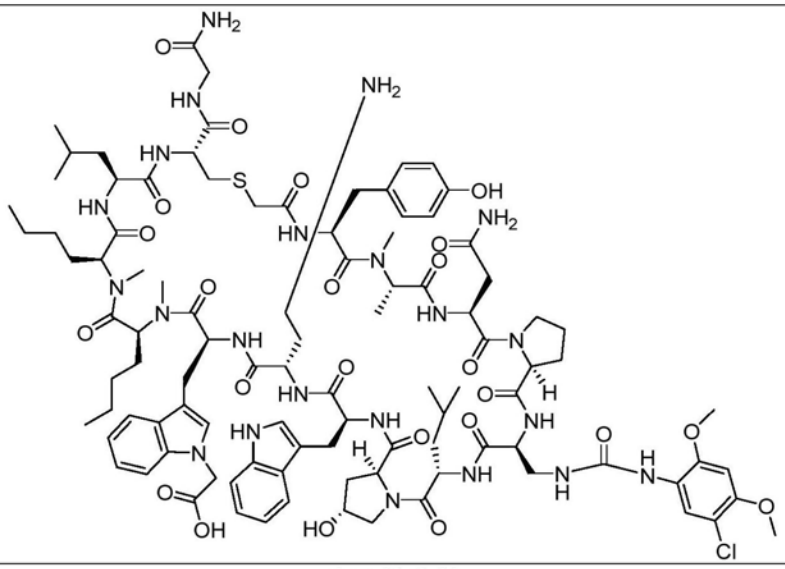
| 化合物1065 |
|---|
|  |

| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基-1,2,3-三甲氧基苯 |

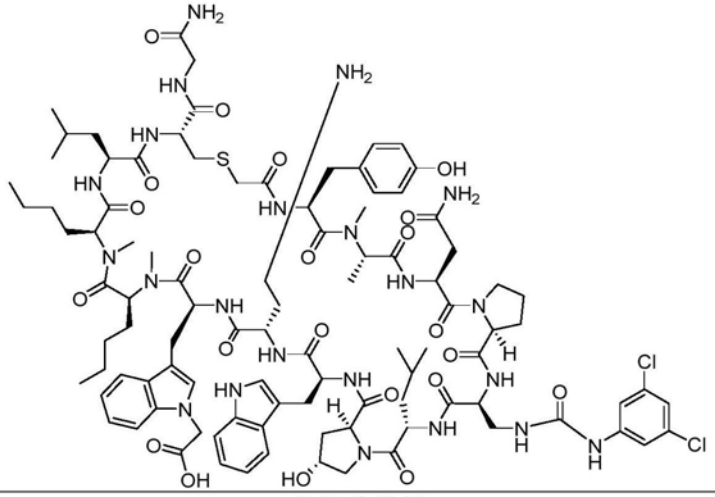
| MS | |
|---|---|
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1057 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1057 |
| 保留时间 | 1.65 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1066 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基-1,3,5-三甲基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1025 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1025 |
| 保留时间 | 1.74 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

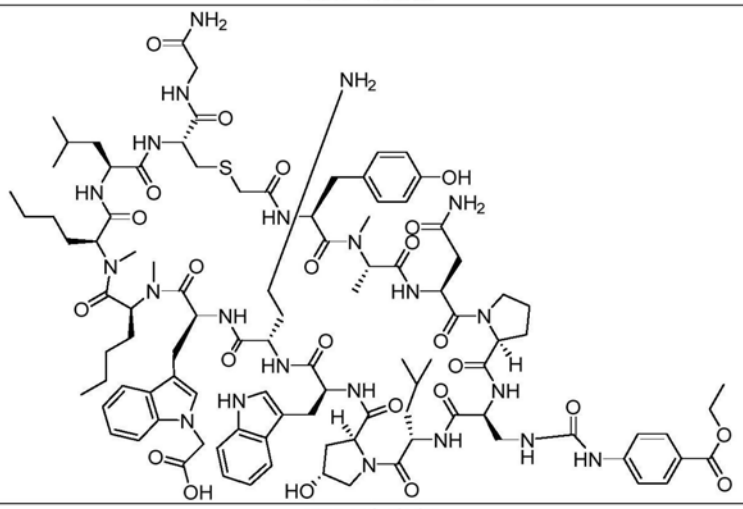
| 化合物1067 |
|---|



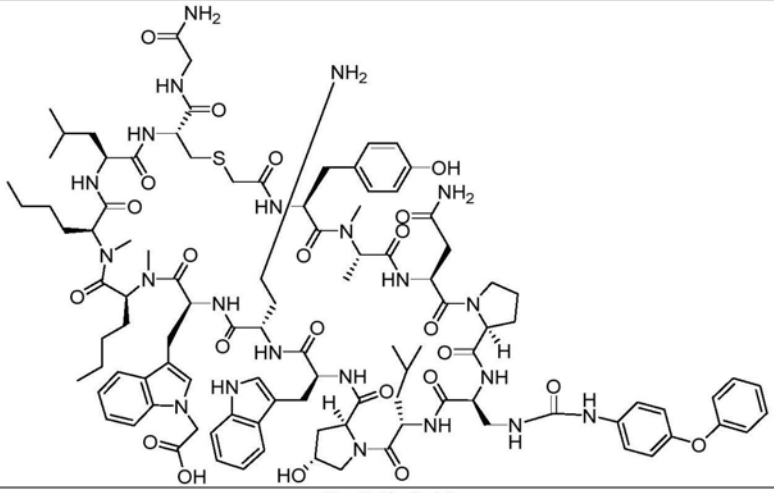
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-氯-5-异氰酰基-2,4-二甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1050 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1050 |
| 保留时间 | 1.71 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1068 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |

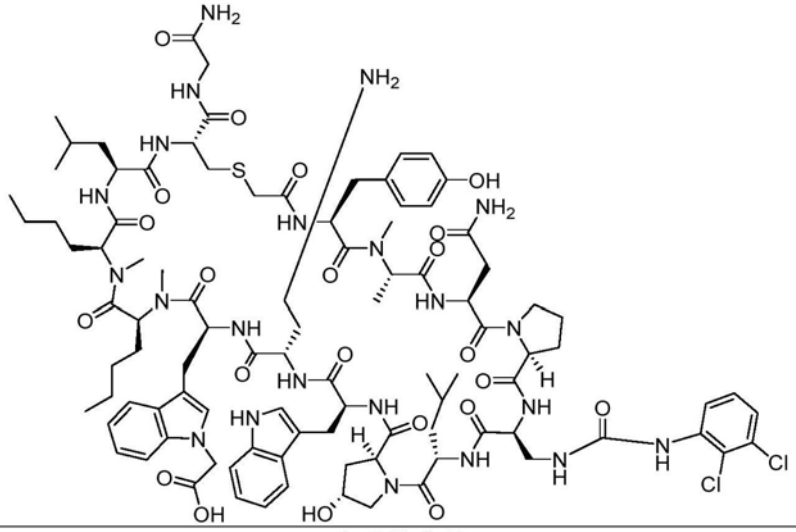
| | |
|---|---|
| 亲电子试剂 | 1,3-二氯-5-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1037 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1037 |
| 保留时间 | 2.00 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| **化合物1069** | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-异氰酰基苯甲酸乙酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1040 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1040 |
| 保留时间 | 1.87 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

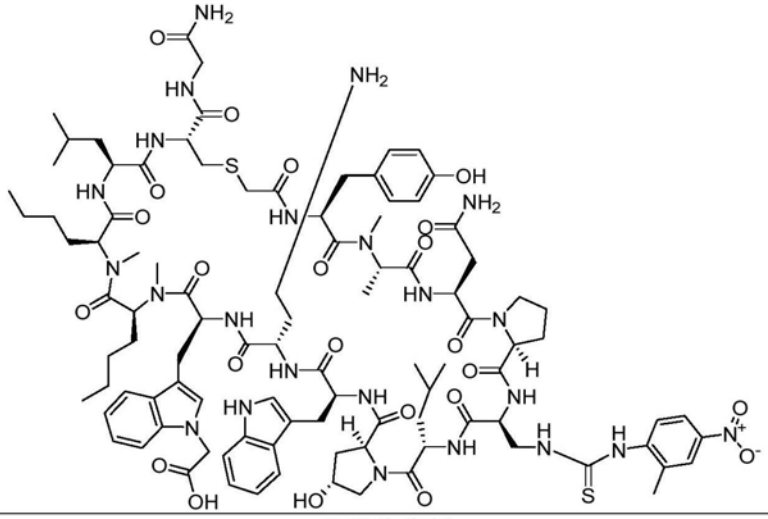
| **化合物1070** |
|---|



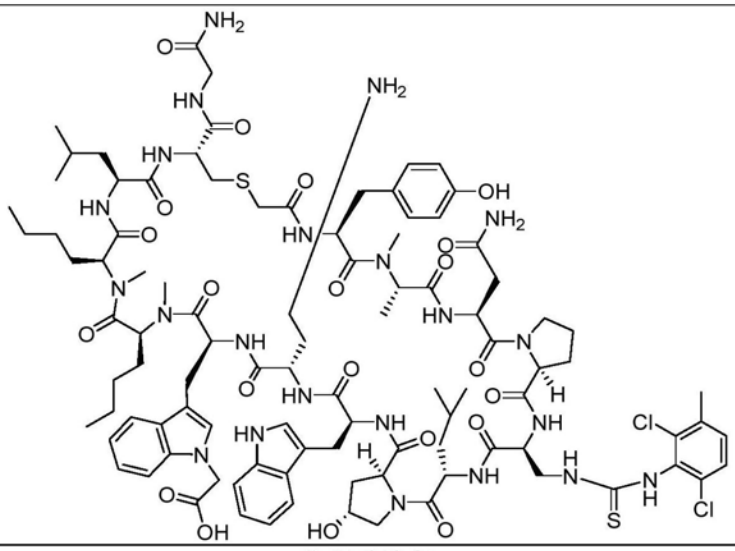
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-4-苯氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1050 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1050 |
| 保留时间 | 1.83 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1071 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,2-二氯-3-异氰酸苯酯 |

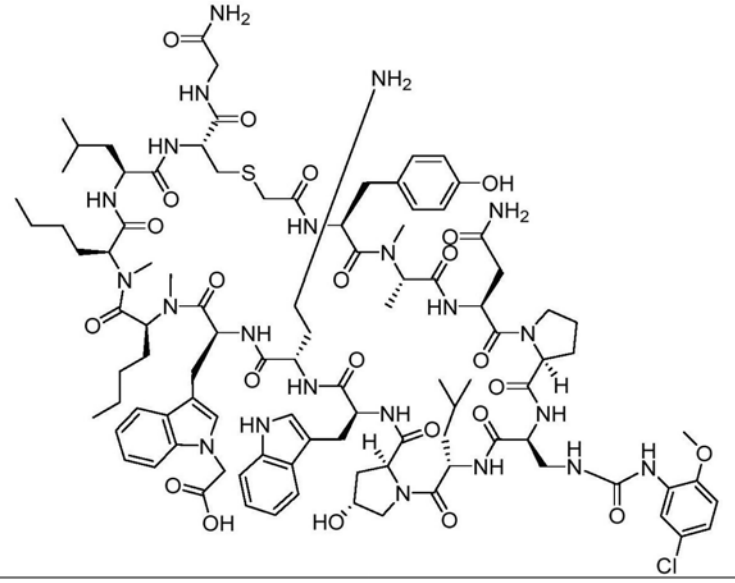
| MS | |
|---|---|
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1037 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1037 |
| 保留时间 | 1.77 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1072 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-2-甲基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1041 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1041 |
| 保留时间 | 1.72 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50 ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

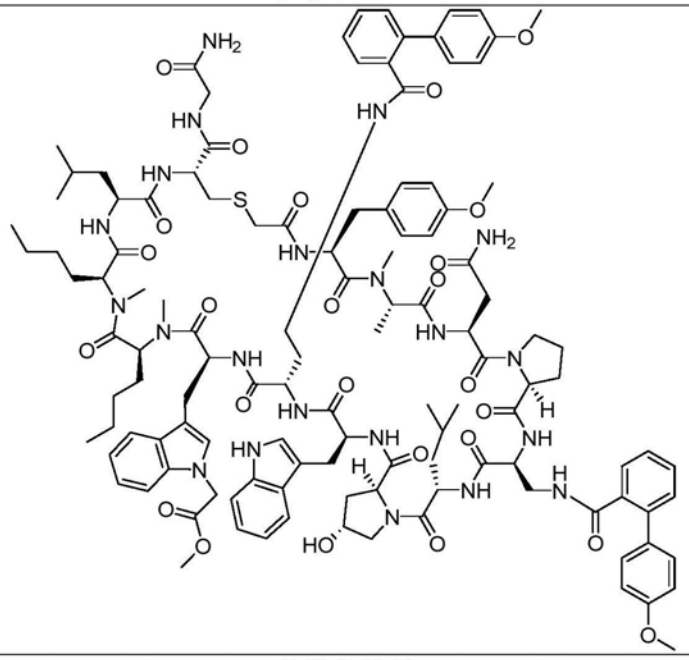
| 化合物1073 |
|---|



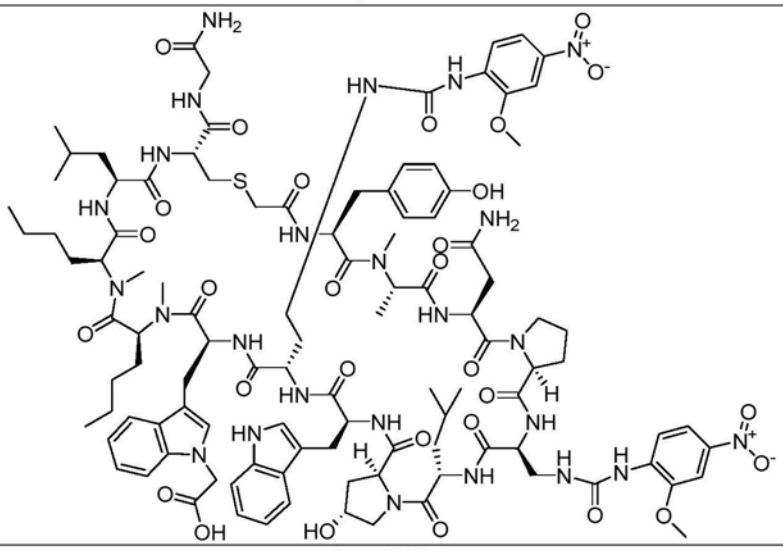
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3-二氯-2-异硫氰酰基-4-甲基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1052 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1052 |
| 保留时间 | 1.80 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1074 |
|---|
|  |

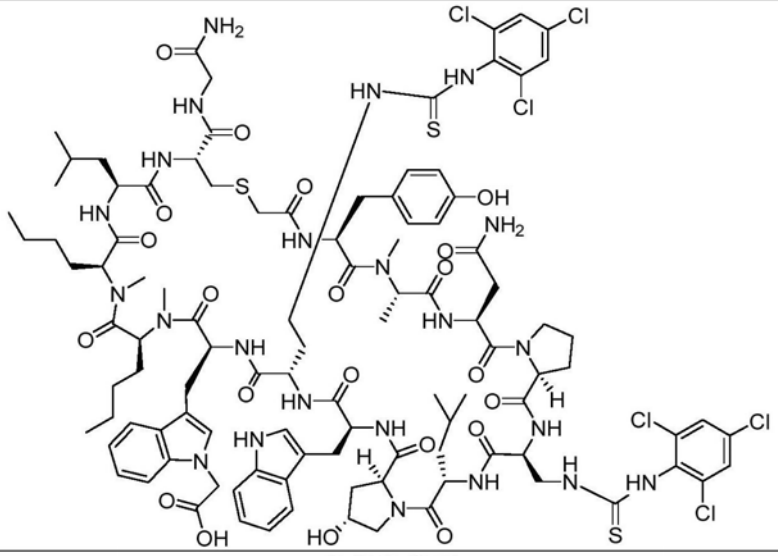
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-氯-2-异氰酰基-1-甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1035 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1035 |
| 保留时间 | 1.84 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1075 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 4'-甲氧基-[1,1'-联苯基]-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1168 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1168 |
| 保留时间 | 2.55 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |

| | |
|---|---|
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

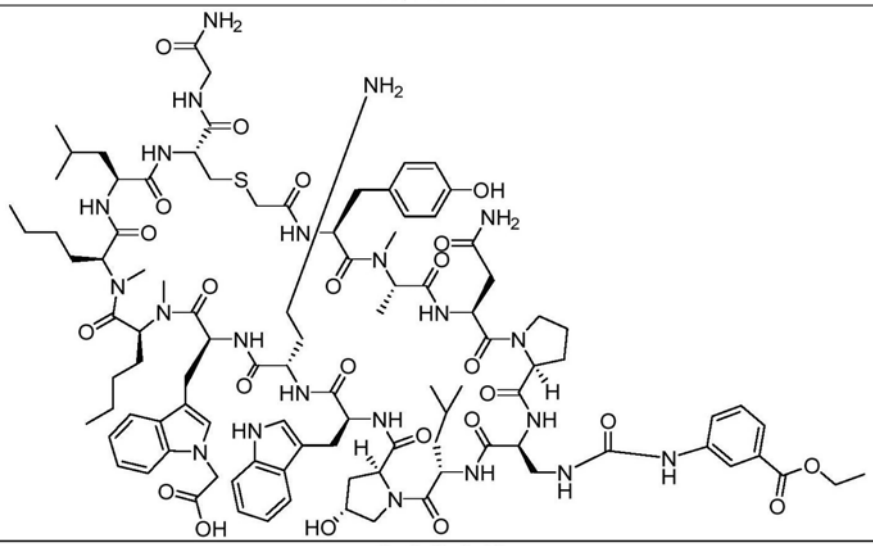
| 化合物1076 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-2-甲氧基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1138 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1138 |
| 保留时间 | 1.87 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1077 |
|---|



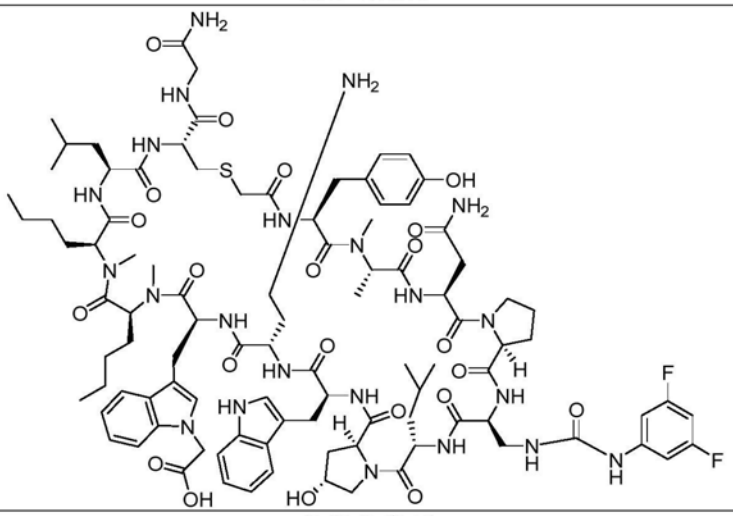
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3,5-三氯-2-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1181 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1181 |
| 保留时间 | 2.07 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

**化合物1078**

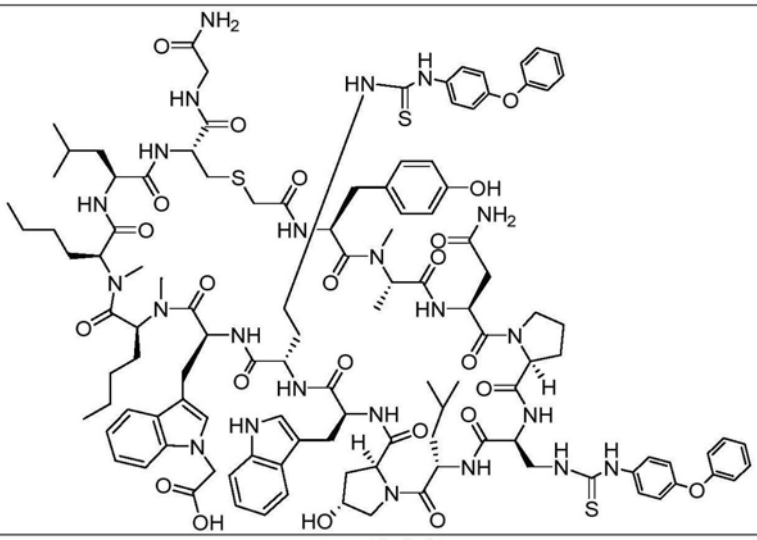


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |

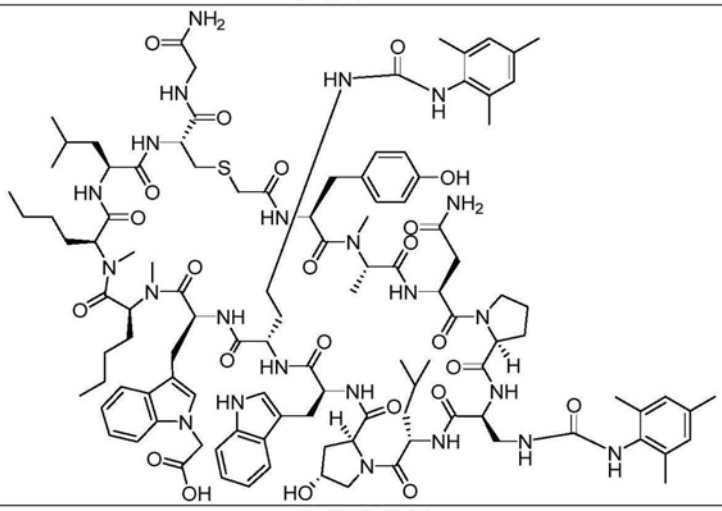
| | |
|---|---|
| 亲电子试剂 | 3-异氰酰基苯甲酸乙酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1040 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1040 |
| 保留时间 | 1.88 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

| **化合物1079** | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3-二氟-5-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1021 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1021 |
| 保留时间 | 1.86 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

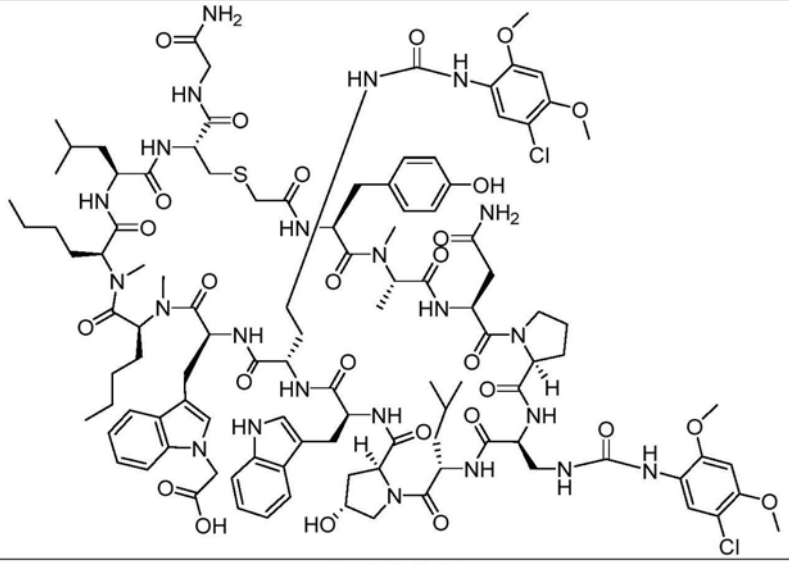
| **化合物1080** |
|---|



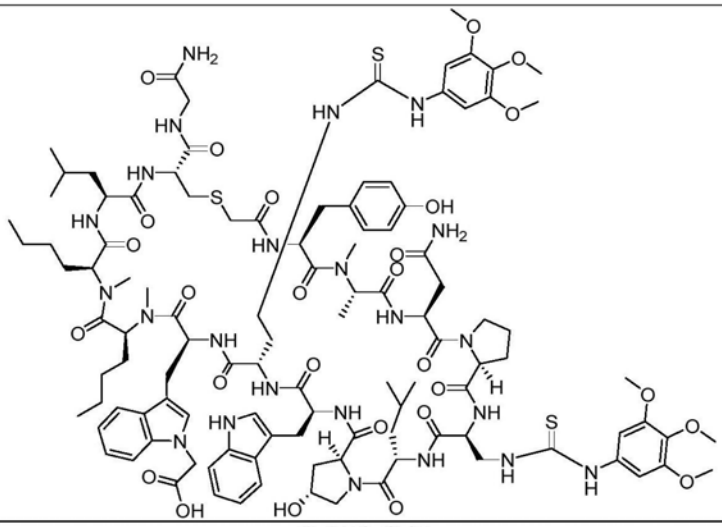
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-4-苯氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1171 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1171 |
| 保留时间 | 2.11 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1081 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基-1,3,5-三甲基苯 |
| **MS** | |

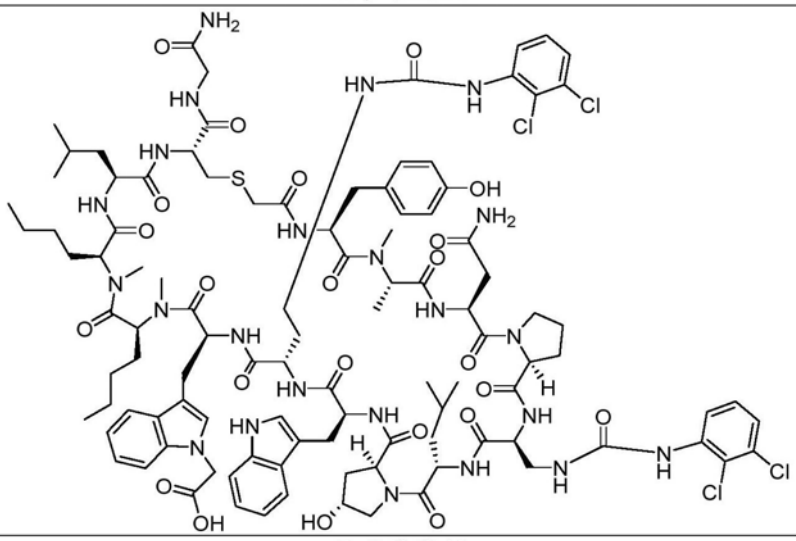
| | |
|---|---|
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1105 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1105 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1082 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-氯-5-异氰酰基-2,4-二甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1157 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1157 |
| 保留时间 | 1.86 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

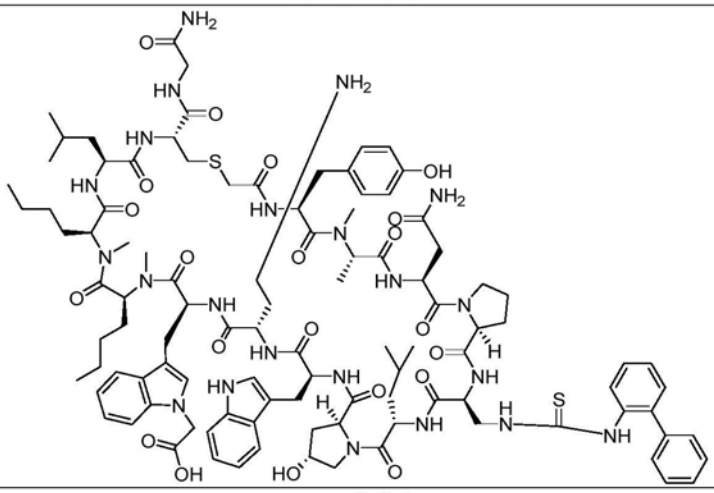
| 化合物1083 |
|---|



| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基-1,2,3-三甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1169 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1169 |
| 保留时间 | 1.79 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

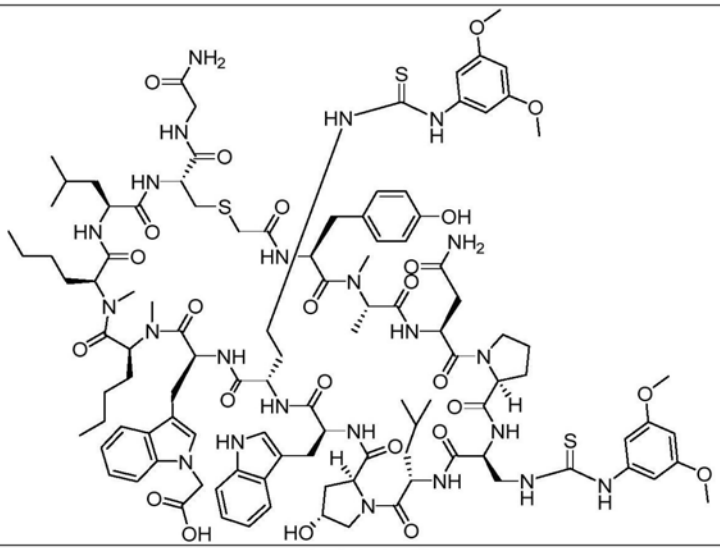
| 化合物1084 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |

| | |
|---|---|
| 亲电子试剂 | 1,2-二氯-3-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1131 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1131 |
| 保留时间 | 2.01 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

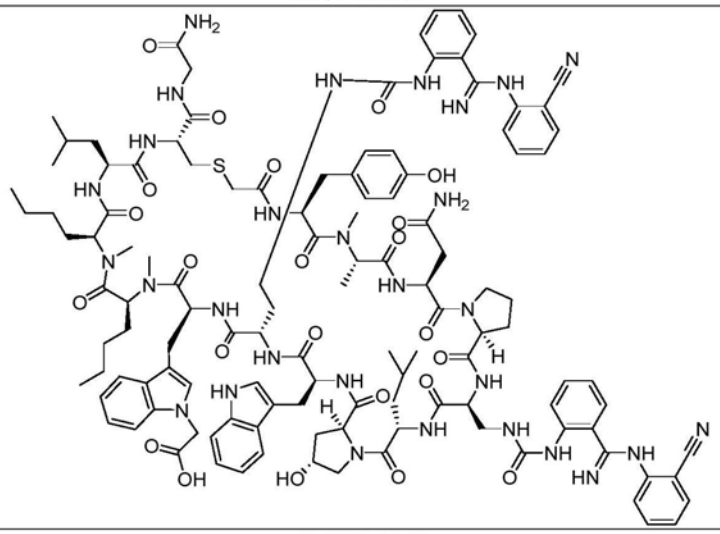
| **化合物1085** |
|---|
|  |

| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基-1,1'-联苯基 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1050 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1050 |
| 保留时间 | 1.97 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

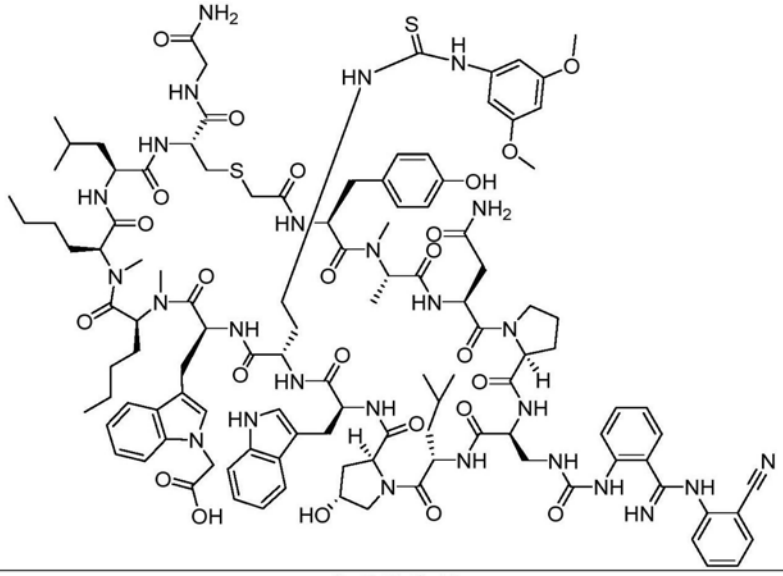
| **化合物1086** |
|---|



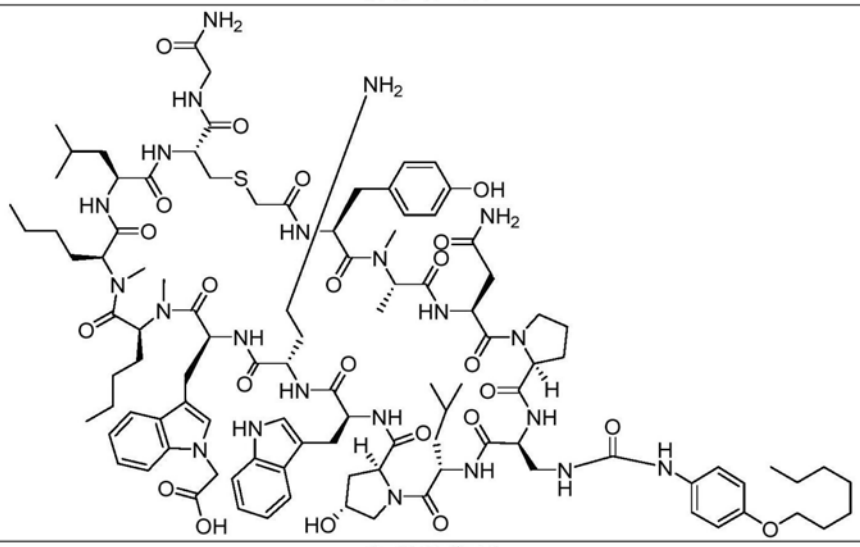
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-3,5-二甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1139 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1139 |
| 保留时间 | 1.83 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

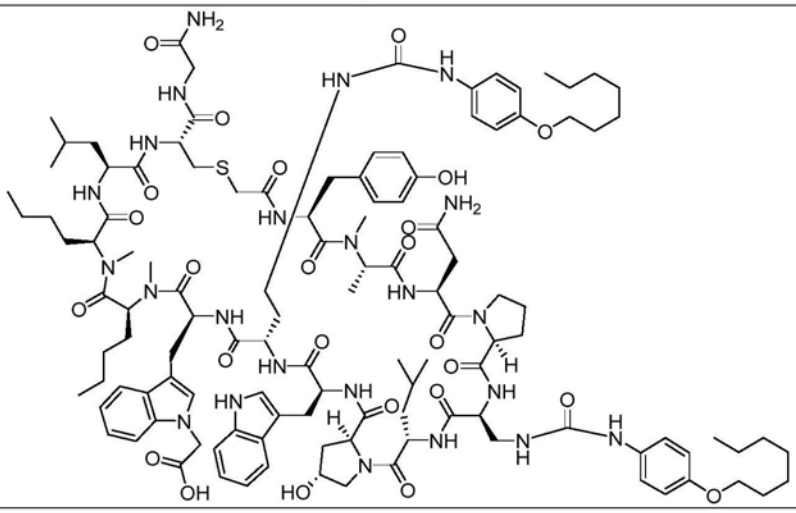
| 化合物1087 |
|---|
|  |
| 使用的试剂 |

| | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基苯甲腈 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1206 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1206 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

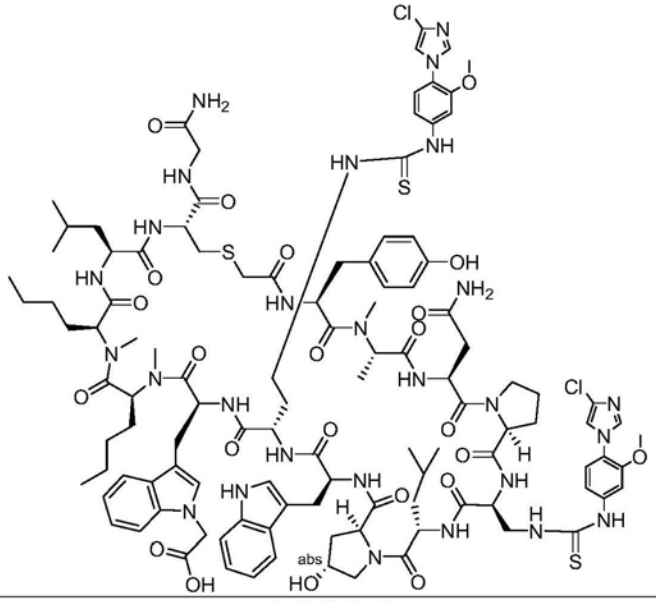
| **化合物1088** |
|---|
|  |
| **使用的试剂** |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基苯甲腈，随后为1-异硫氰酰基-3,5-二甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1173 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1173 |
| 保留时间 | 1.89 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |

| | |
|---|---|
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

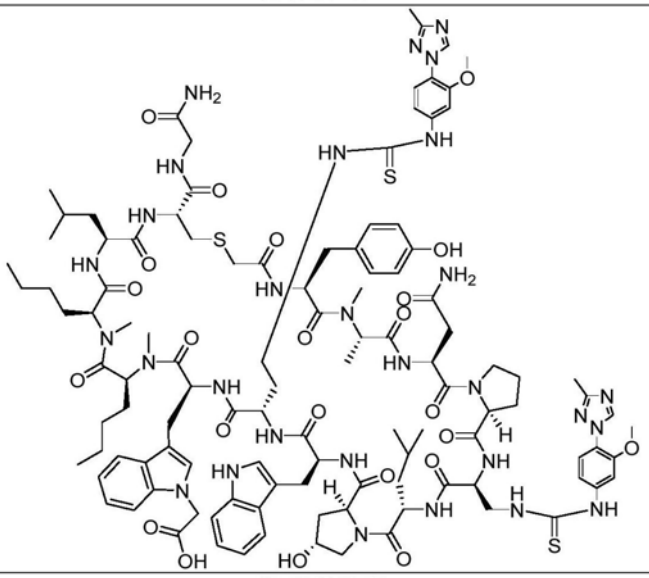
| 化合物1089 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-(庚基氧基)-4-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1061 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1061 |
| 保留时间 | 2.20 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1090 |
|---|
|  |

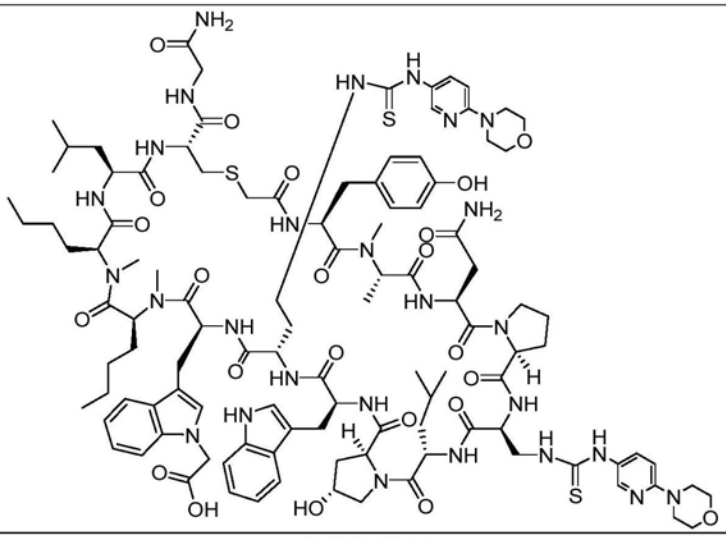
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-(庚基氧基)-4-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1177 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1177 |
| 保留时间 | 2.50 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1091 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-氯-1-(4-异硫氰酰基-2-甲氧基苯基)-1H-咪唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1209 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1209 |
| 保留时间 | 1.88 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |

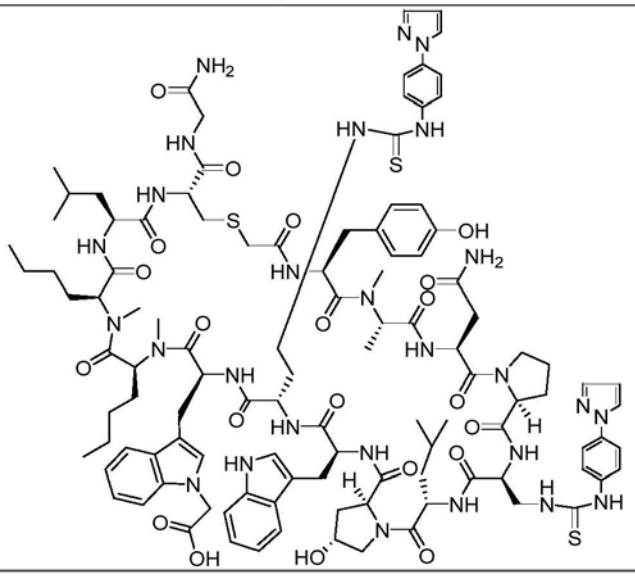
| | |
|---|---|
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

| 化合物1092 | |
|---|---|
|  | |
| 使用的试剂 | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-(4-异硫氰酰基-2-甲氧基苯基)-3-甲基-1H-1,2,4-三唑 |
| MS | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1190 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1190 |
| 保留时间 | 1.74 min |
| LC条件 | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

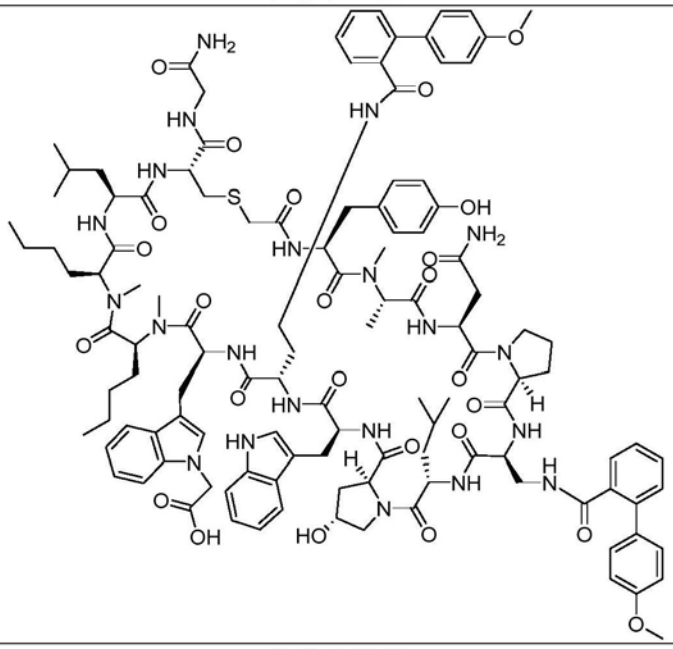
| 化合物1093 |
|---|



| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-(5-异硫氰酰基吡啶-2-基)吗啉 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1165 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1165 |
| 保留时间 | 1.70 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

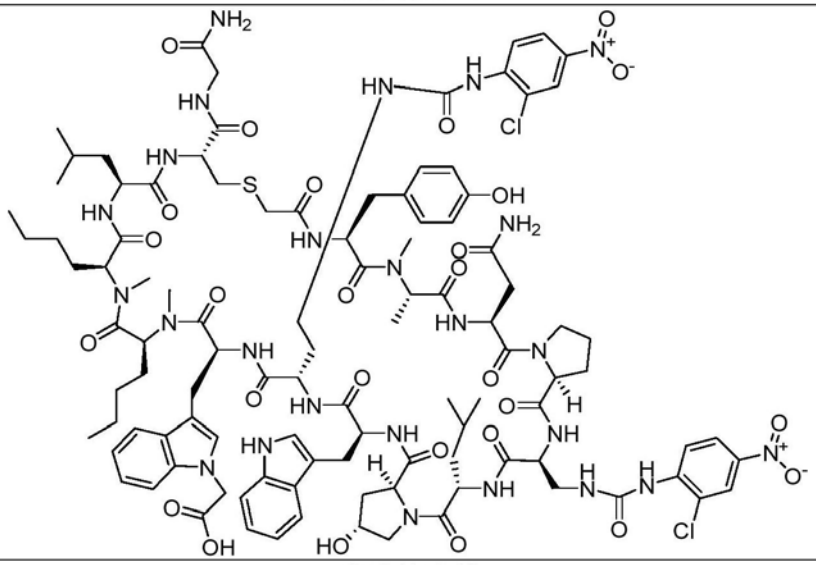
| 化合物1094 |
|---|
|  |
| 使用的试剂 |

| | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-(4-异硫氰酰基苯基)-1H-吡唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1145 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1145 |
| 保留时间 | 1.82 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

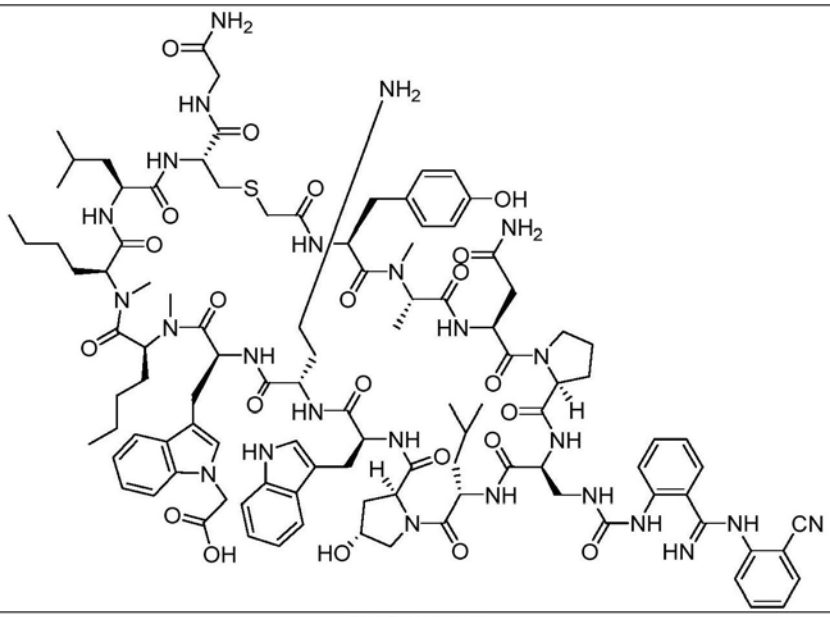
| 化合物1095 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4'-甲氧基-[1,1'-联苯基]-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1154 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1154 |
| 保留时间 | 1.98 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |

| | |
| --- | --- |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

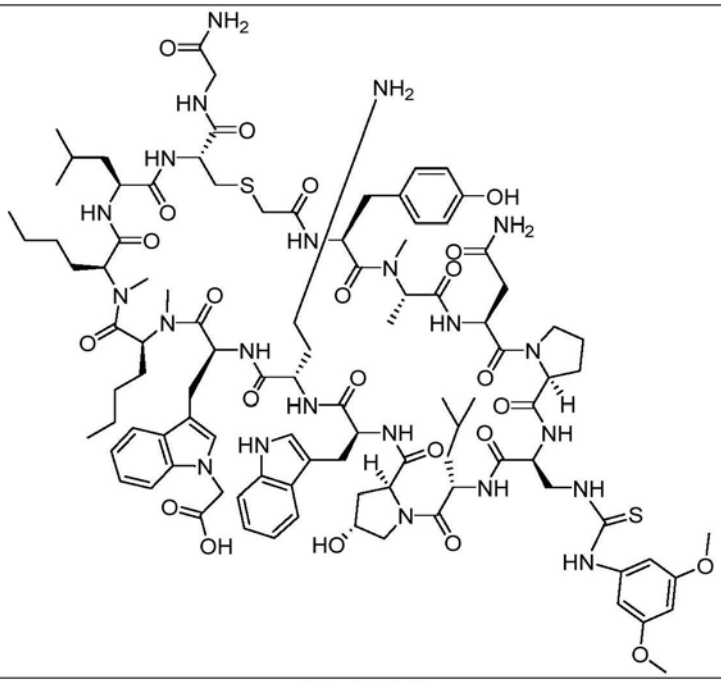
| 化合物1096 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-氯-1-异氰酰基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1142 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1142 |
| 保留时间 | 2.08 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1097 |
|---|

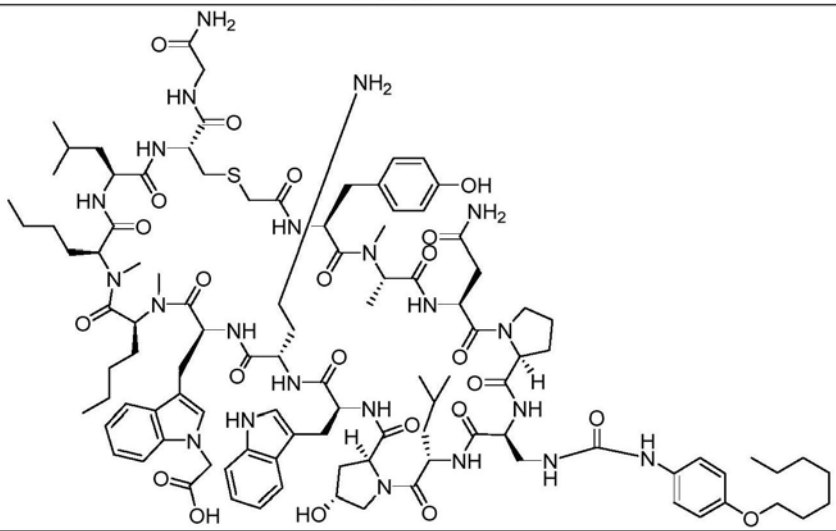


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基苯甲腈 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1075 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1075 |
| 保留时间 | 1.87 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

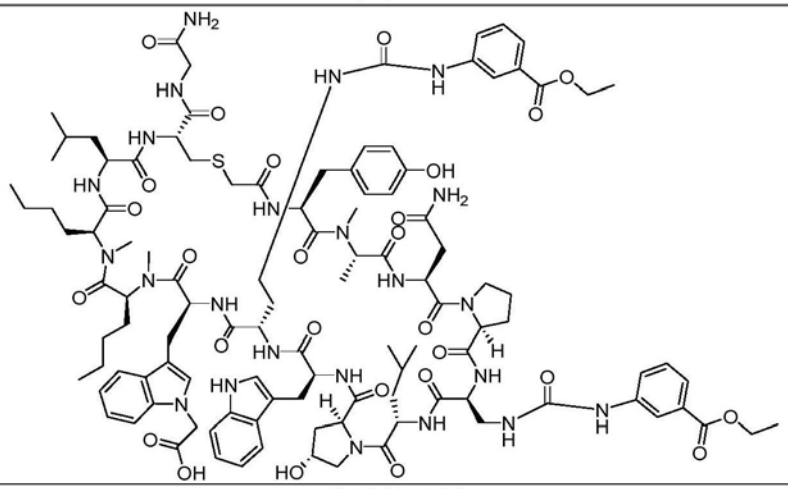
**化合物1098**



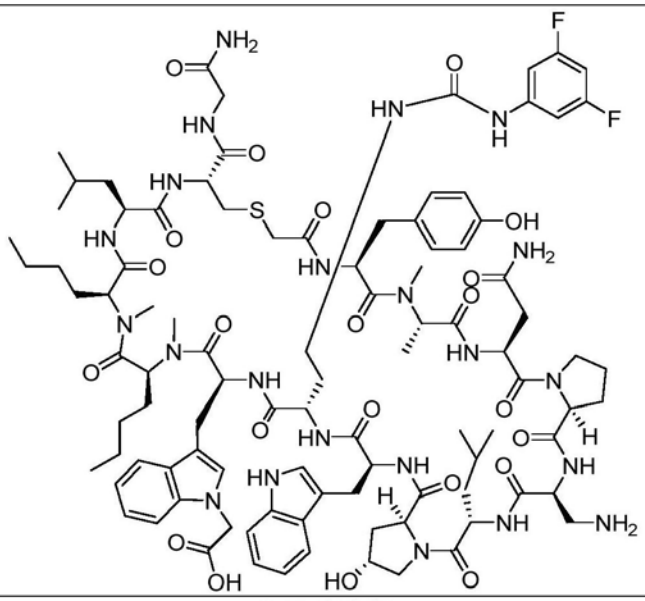
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-3,5-二甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1041 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1041 |
| 保留时间 | 1.55 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

| 化合物1099 |
| --- |
|  |

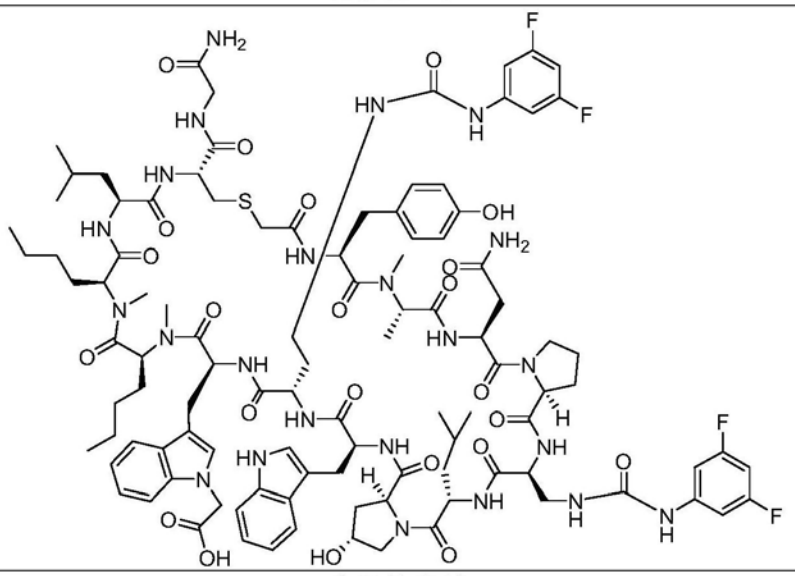
| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-(庚基氧基)-4-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1061 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1061 |
| 保留时间 | 1.81 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

| 化合物1100 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 3-异氰酰基苯甲酸乙酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1135 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1135 |
| 保留时间 | 1.90 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

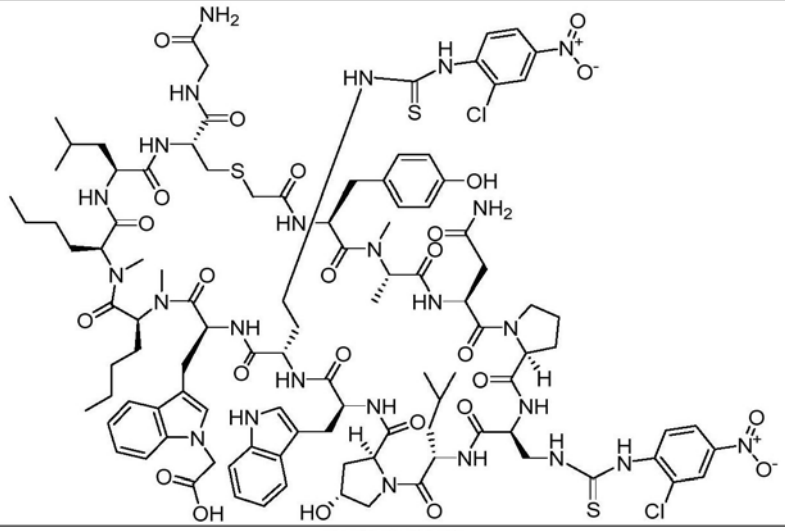
| 化合物1101 |
|---|

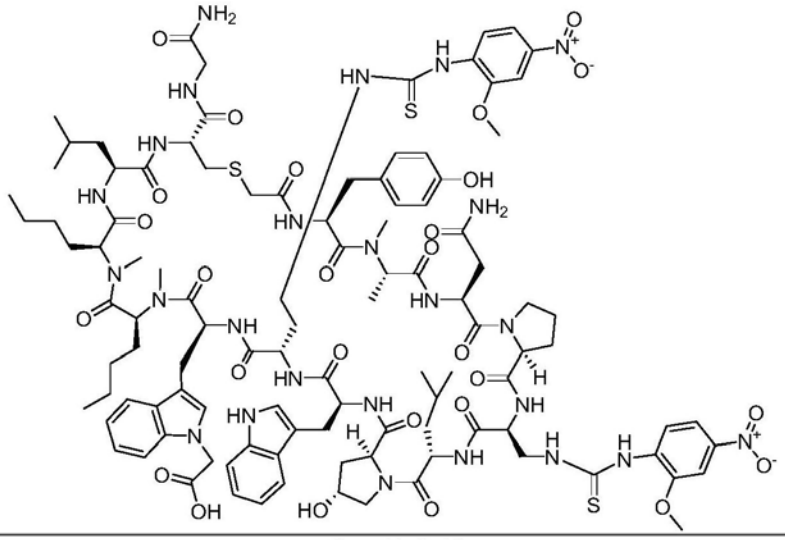


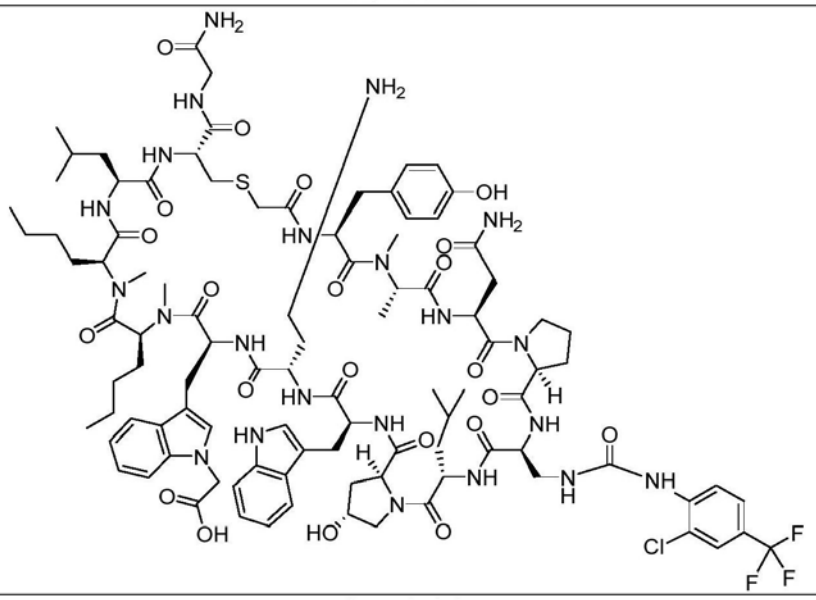
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3-二氟-5-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1021 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1021 |
| 保留时间 | 1.88 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1102 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

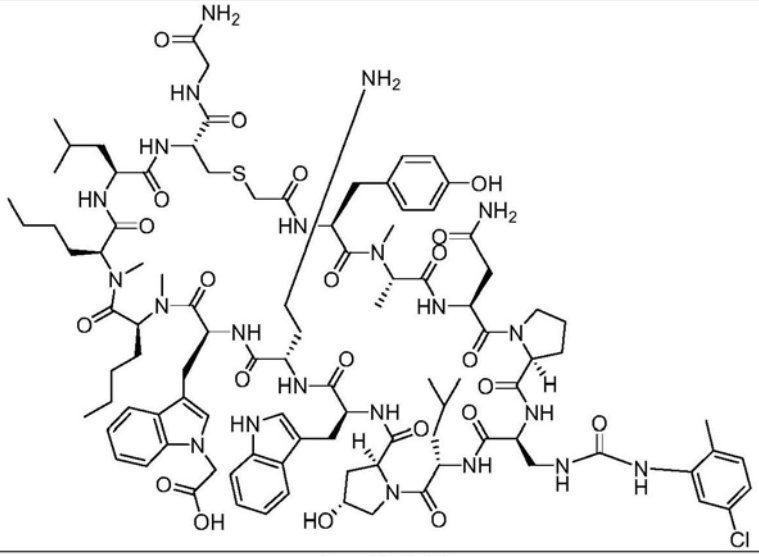
| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3-二氟-5-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1099 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1099 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1103 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-氯-1-异硫氰酰基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1158 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1158 |
| 保留时间 | 2.00 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1104 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-2-甲氧基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1154 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1154 |
| 保留时间 | 1.90 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

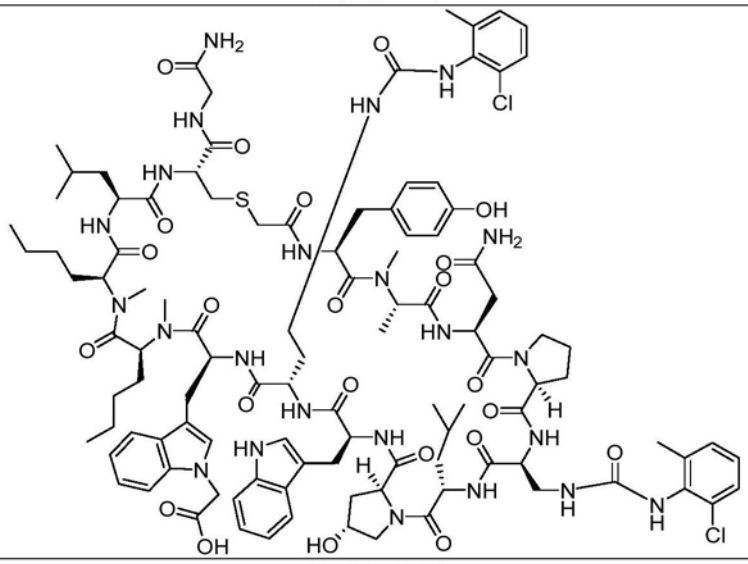
| 化合物1105 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-氯-1-异氰酰基-4-(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1054 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1054 |
| 保留时间 | 1.97 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70℃ |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

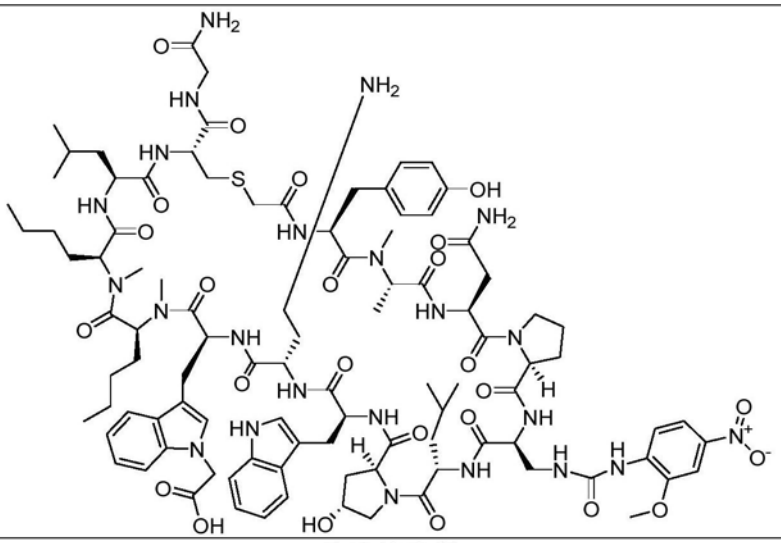
| 化合物1106 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-氯-2-异氰酰基-1-甲基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 - H)$^+$计算值 | 1025 |
| MS (M/2 - H)$^+$实测值 | 1025 |
| 保留时间 | 1.73 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70℃ |

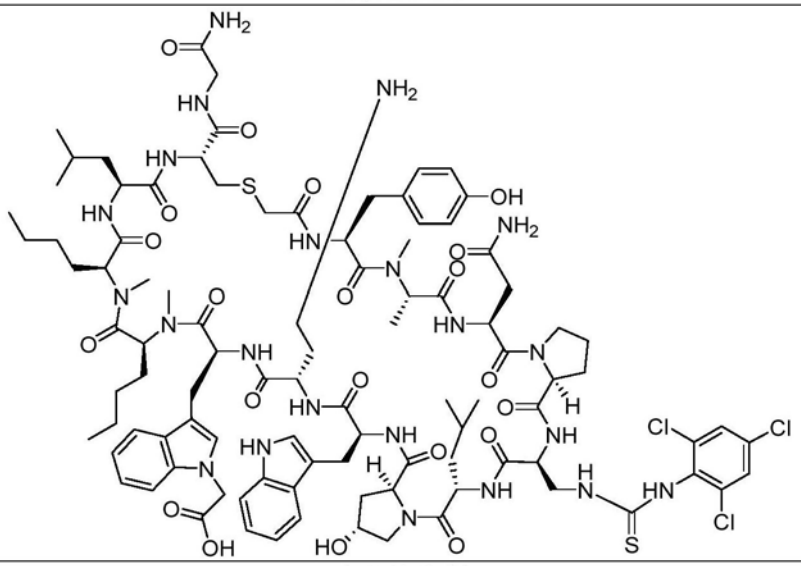
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |
| --- | --- |

| 化合物1107 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-氯-2-异氰酰基-3-甲基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1111 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1111 |
| 保留时间 | 1.67 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

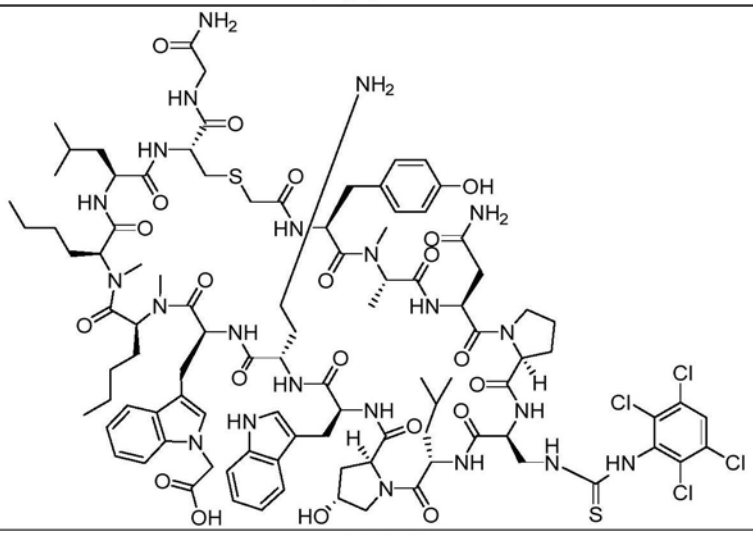
| 化合物1108 |
|---|



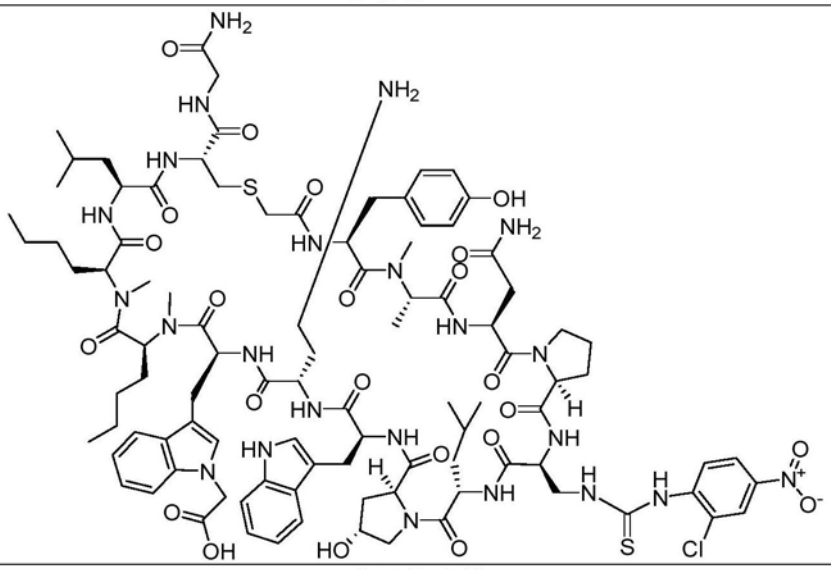
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-2-甲氧基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1041 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1041 |
| 保留时间 | 1.71 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1109 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

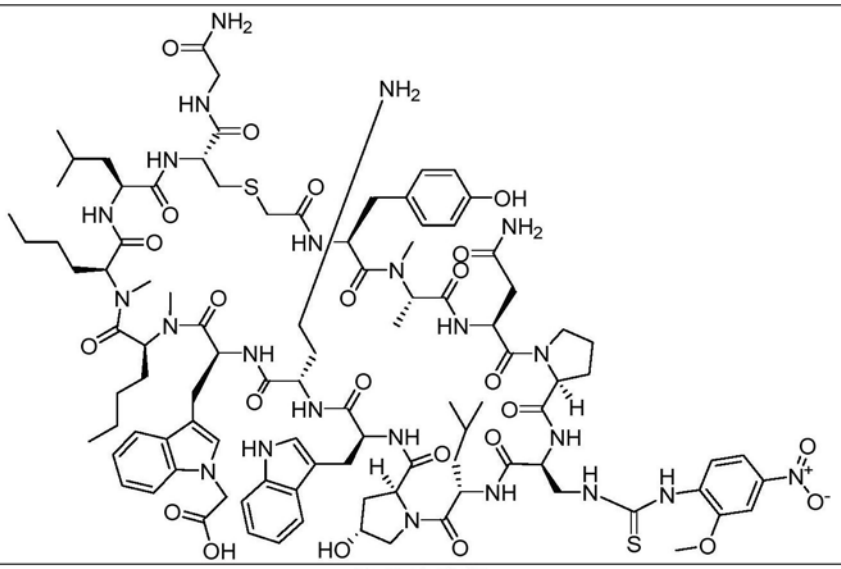
| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3,5-三氯-2-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1062 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1062 |
| 保留时间 | 1.81 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1110 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,2,4,5-四氯-3-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1079 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1079 |
| 保留时间 | 1.85 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |

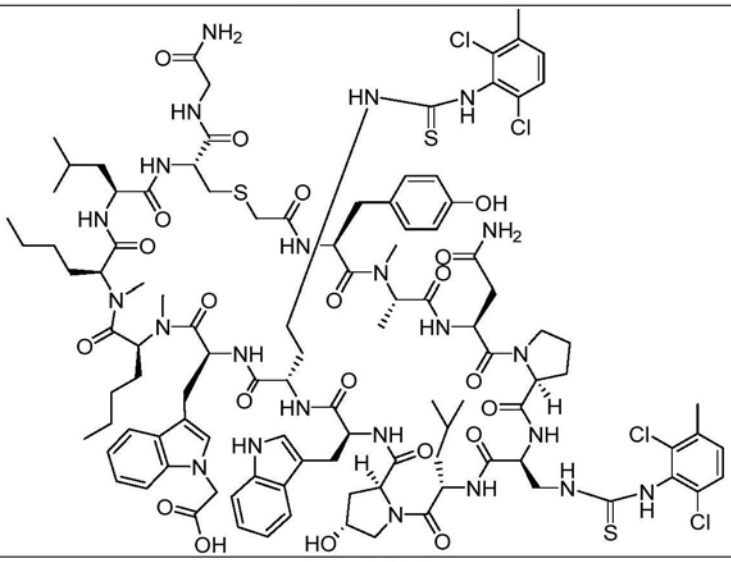
| | |
|---|---|
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1111 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-氯-1-异硫氰酰基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1051 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1051 |
| 保留时间 | 1.75 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

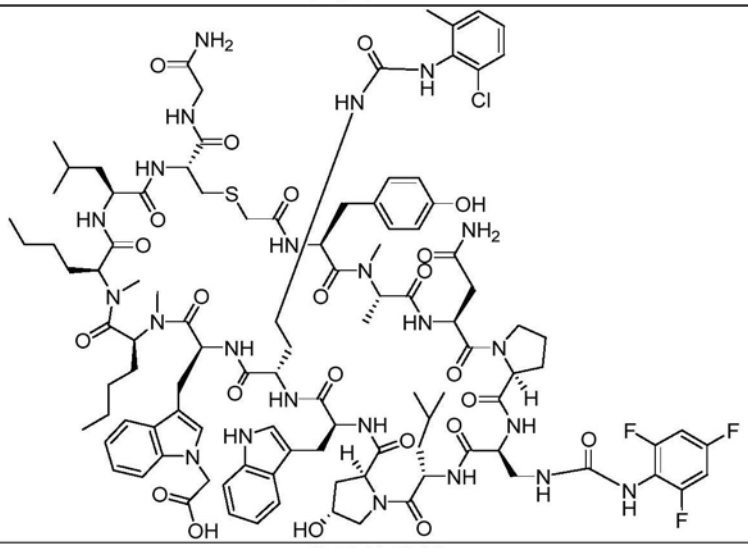
| 化合物1112 |
|---|

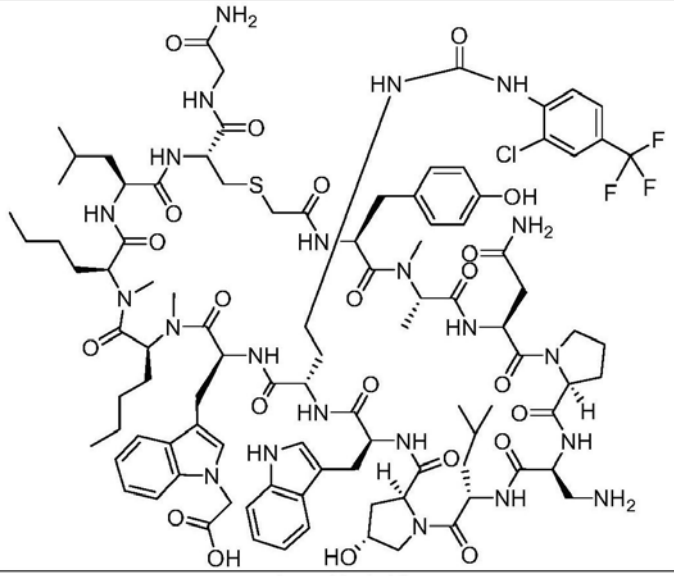


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-2-甲氧基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1049 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1049 |
| 保留时间 | 1.73 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

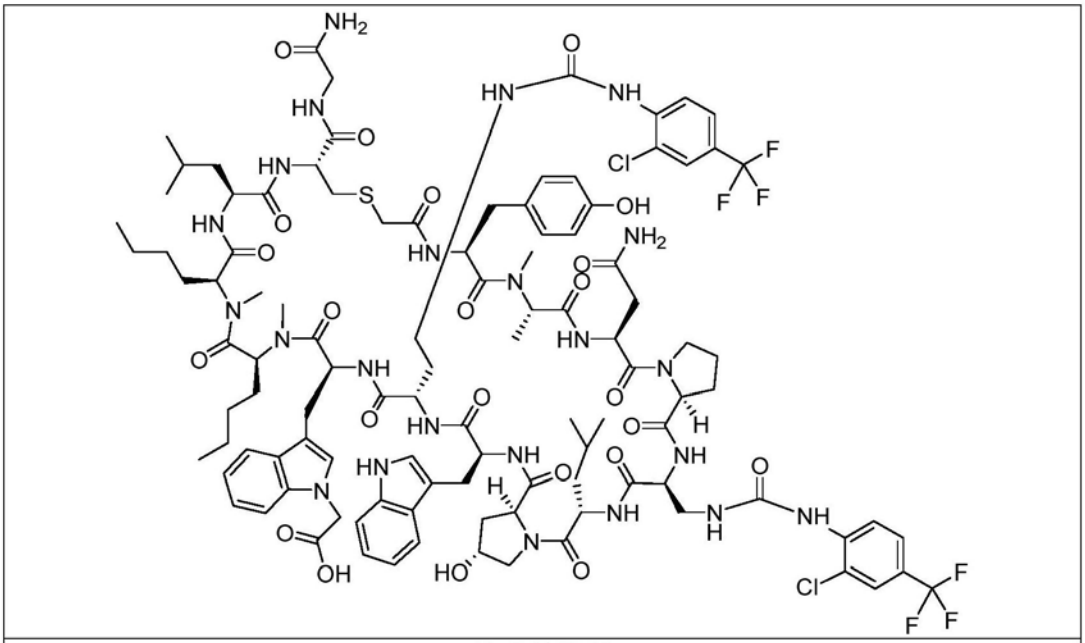
| 化合物1113 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3-二氯-2-异硫氰酰基-4-甲基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1161 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1161 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1114 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,3,5-三氟-2-异氰酸苯酯，随后为1-氯-2-异氰酰基-3-甲基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1114 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1114 |
| 保留时间 | 1.77 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

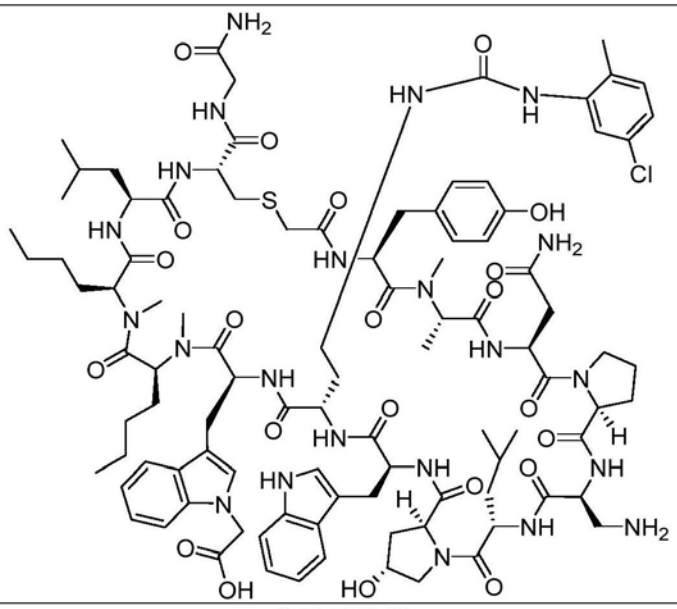
| 化合物1115 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-氯-1-异氰酰基-4-(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 - H)$^+$计算值 | 1052 |
| MS (M/2 - H)$^+$实测值 | 1052 |
| 保留时间 | 1.77 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1116 |
|---|

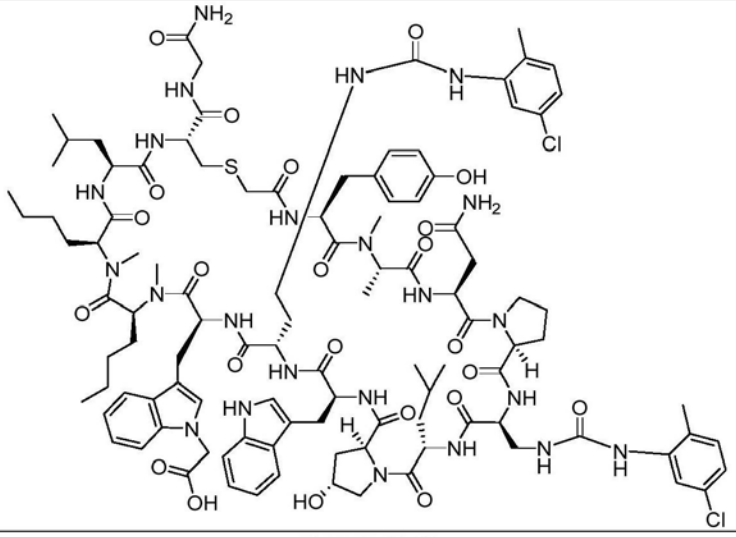


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-氯-1-异氰酰基-4-(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1165 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1165 |
| 保留时间 | 2.13 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

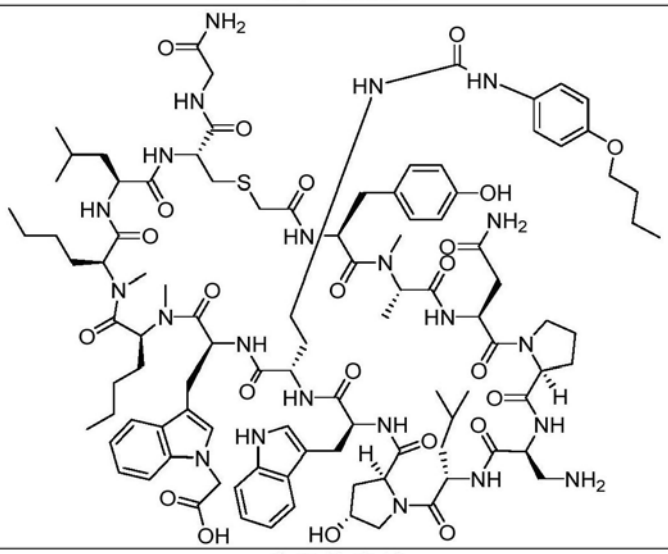
| 化合物1117 |
|---|

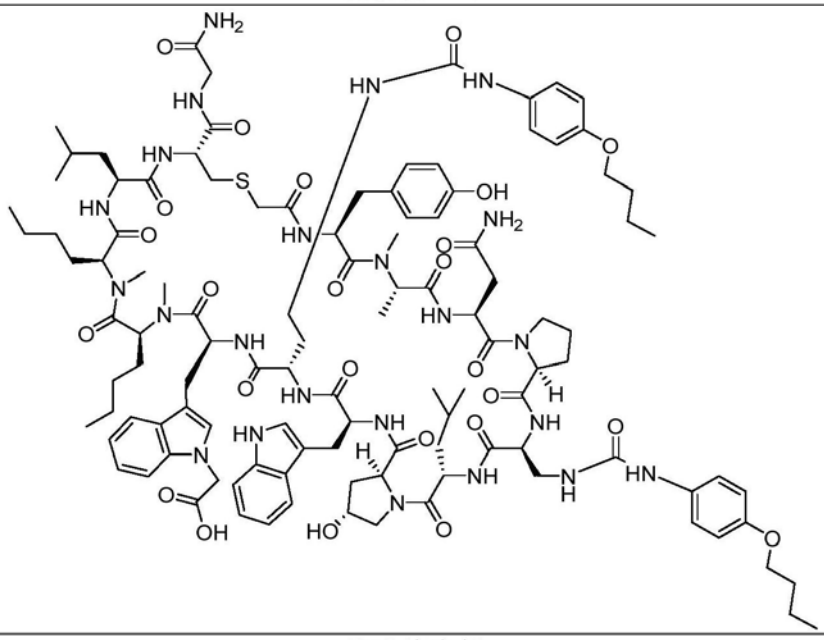


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-氯-2-异氰酰基-1-甲基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1027 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1027 |
| 保留时间 | 1.89 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

| 化合物1118 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

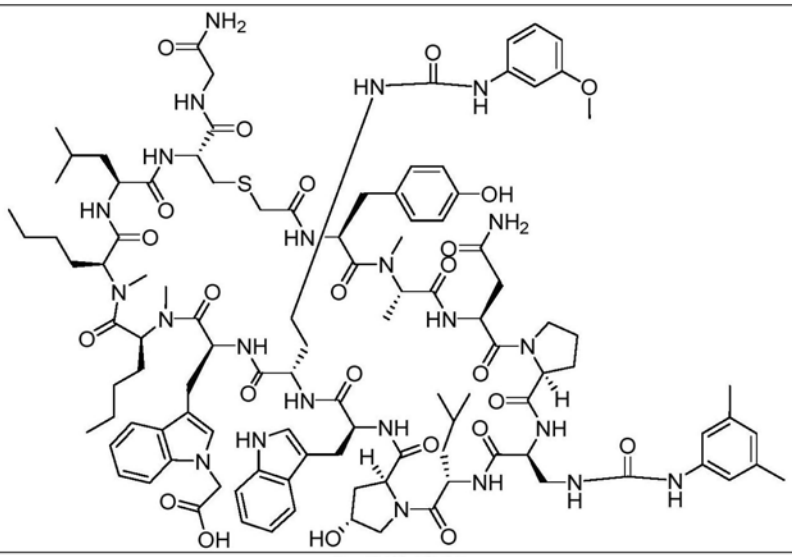
| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-氯-2-异氰酰基-1-甲基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1111 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1111 |
| 保留时间 | 1.95 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1119 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-丁氧基-4-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 - H)$^+$计算值 | 1038 |
| MS (M/2 - H)$^+$实测值 | 1038 |
| 保留时间 | 1.96 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

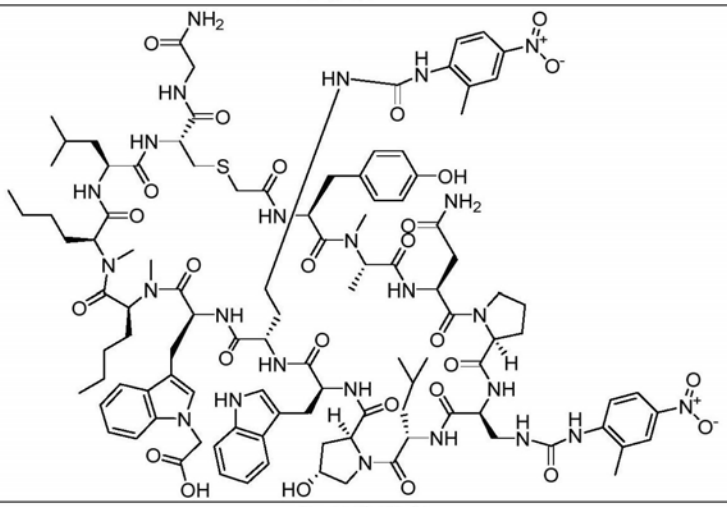
| 化合物1120 |
|---|
|  |

| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-丁氧基-4-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1135 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1135 |
| 保留时间 | 2.08 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

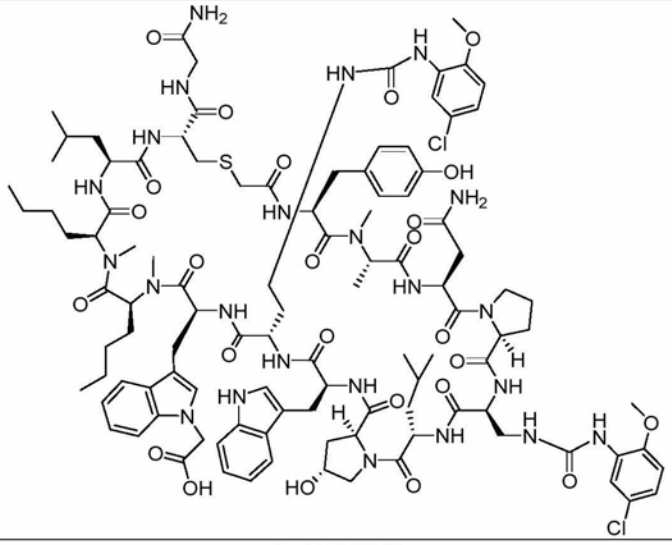
| 化合物1121 |
|---|



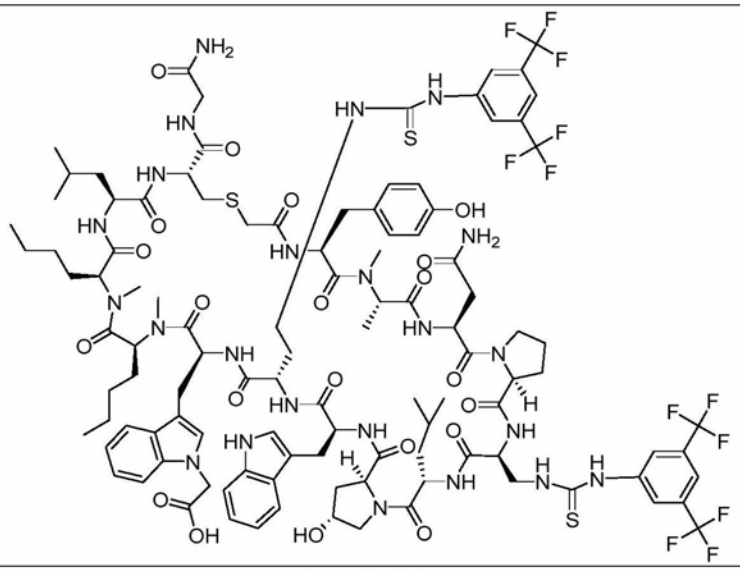
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-3,5-二甲基苯，随后为1-异氰酰基-3-甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1092 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1092 |
| 保留时间 | 1.85 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物1122 |
| --- |
|  |
| **使用的试剂** |
| 起始材料 BMT-001 |

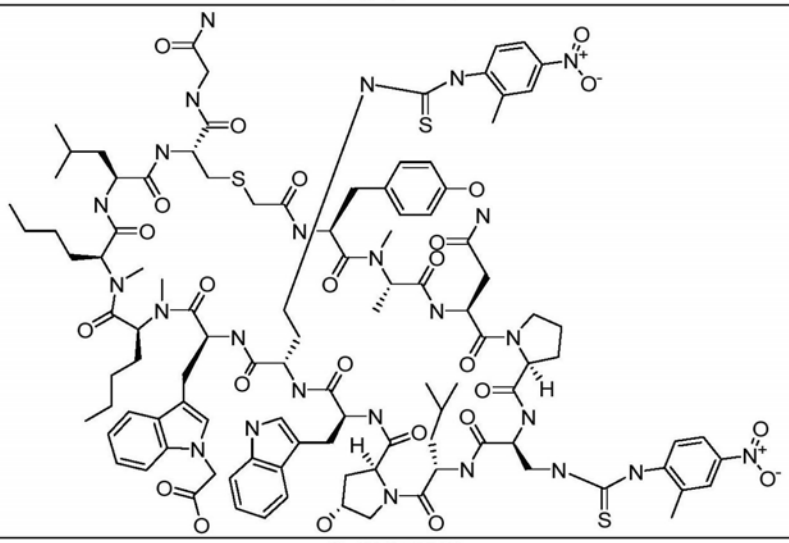
| | |
| --- | --- |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-2-甲基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1122 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1122 |
| 保留时间 | 2.01 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1123 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-氯-2-异氰酰基-1-甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1127 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1127 |
| 保留时间 | 2.11 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50℃ |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

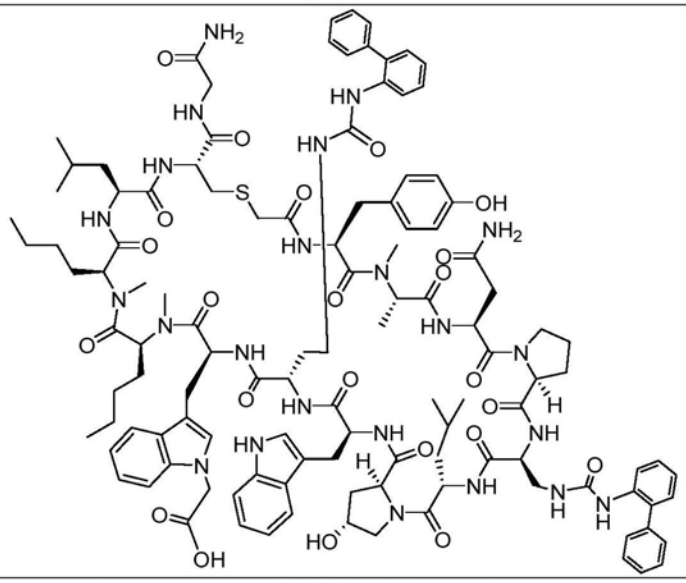
| 化合物1124 |
|---|



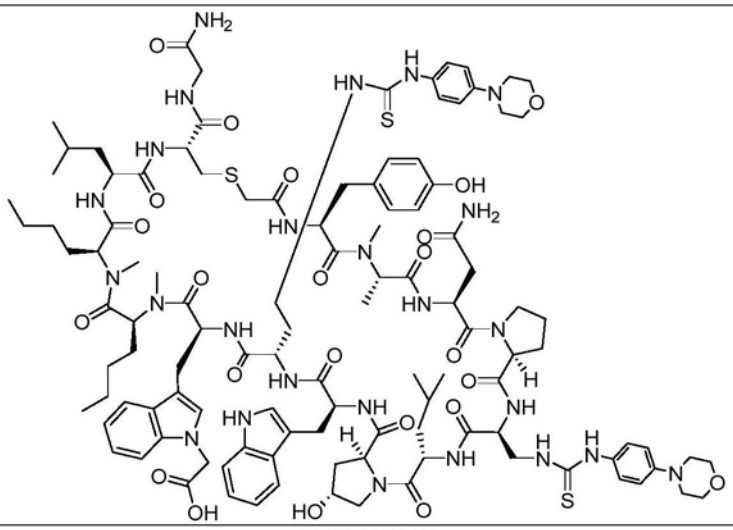
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-3,5-双(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1215 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1214 |
| 保留时间 | 2.44 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

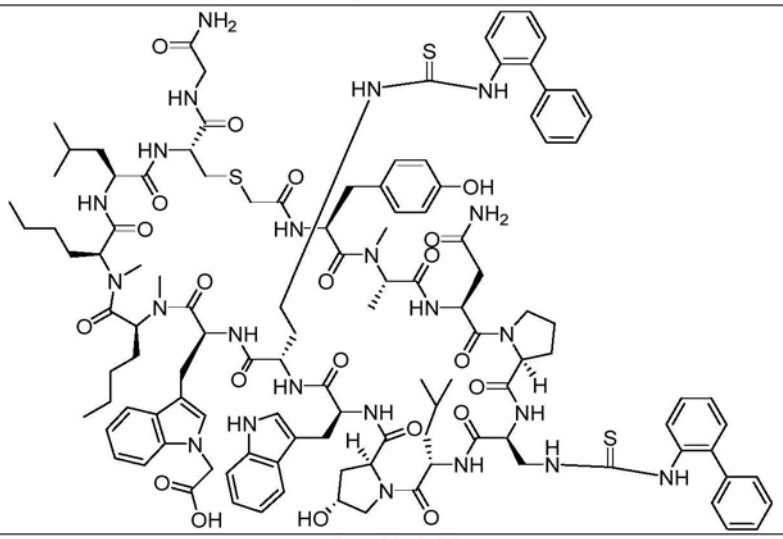
| 化合物1125 |
|---|
|  |
| 使用的试剂 |

| | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-2-甲基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1138 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1138 |
| 保留时间 | 2.04 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

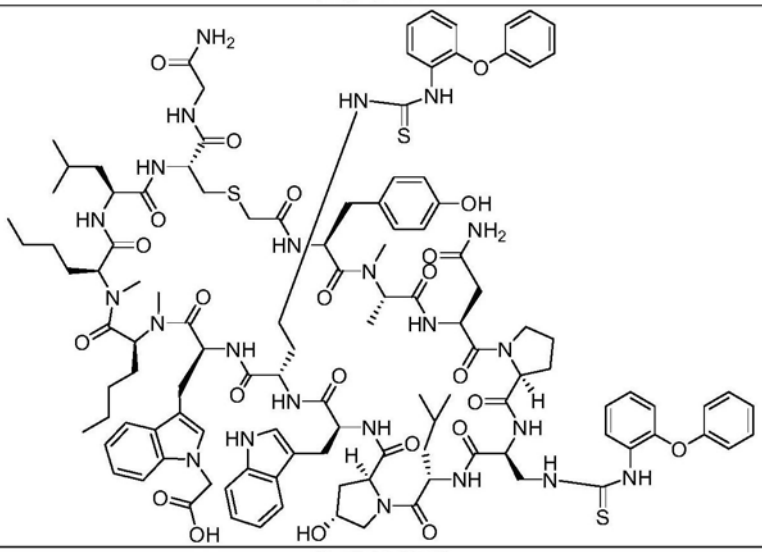
| 化合物1126 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基-1,1'-联苯基 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1139 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1139 |
| 保留时间 | 2.05 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |

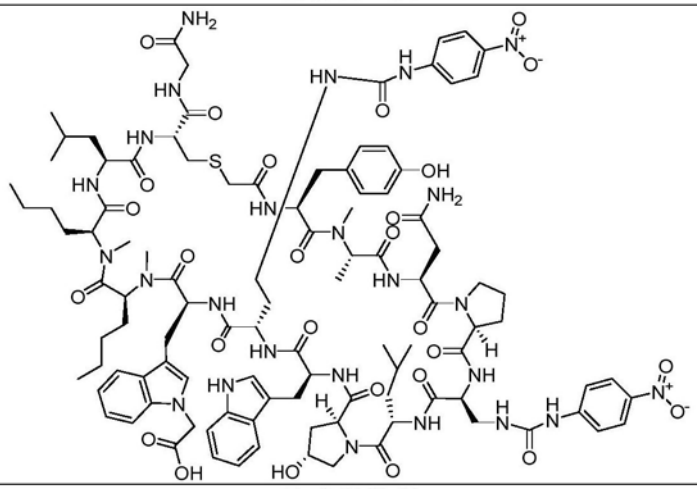
| | |
|---|---|
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

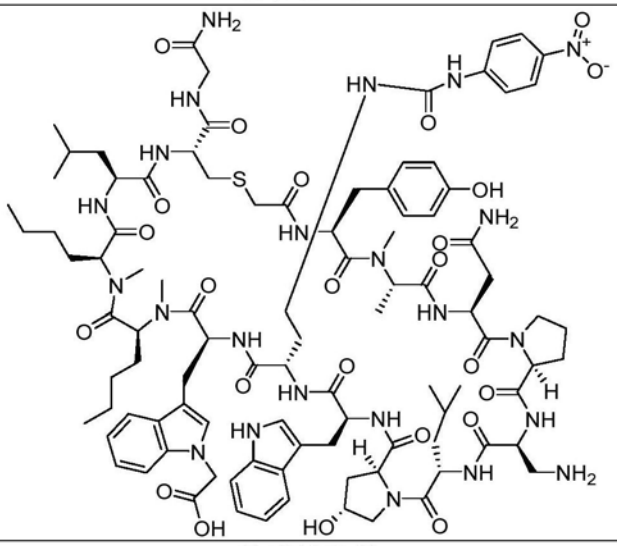
| 化合物1127 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-(4-异硫氰酰基苯基)吗啉 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1164 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1164 |
| 保留时间 | 1.75 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

| 化合物1128 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

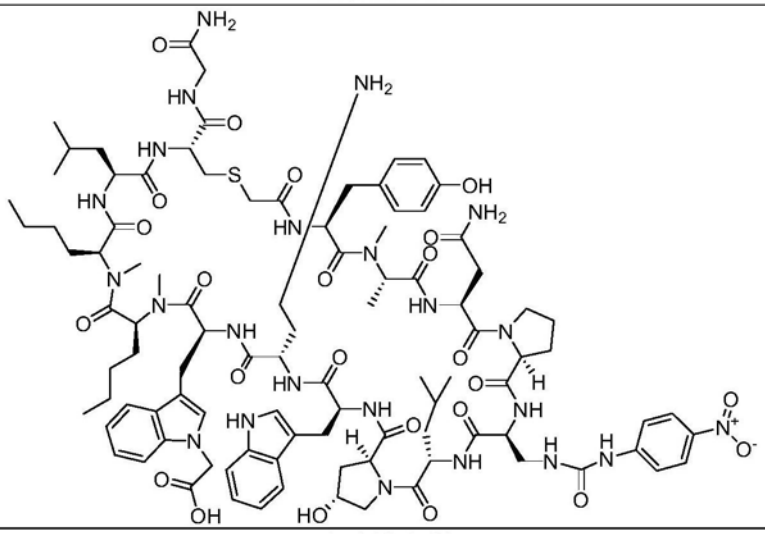
| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基-1,1'-联苯基 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1155 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1155 |
| 保留时间 | 2.04 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

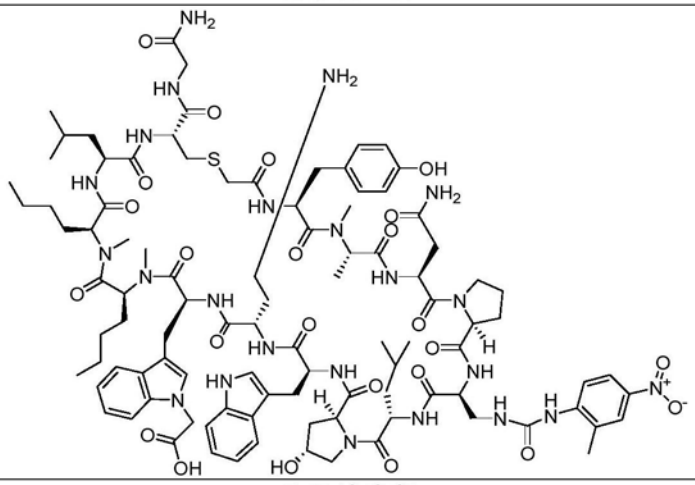
| 化合物1129 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-2-苯氧基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1171 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1171 |
| 保留时间 | 2.20 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

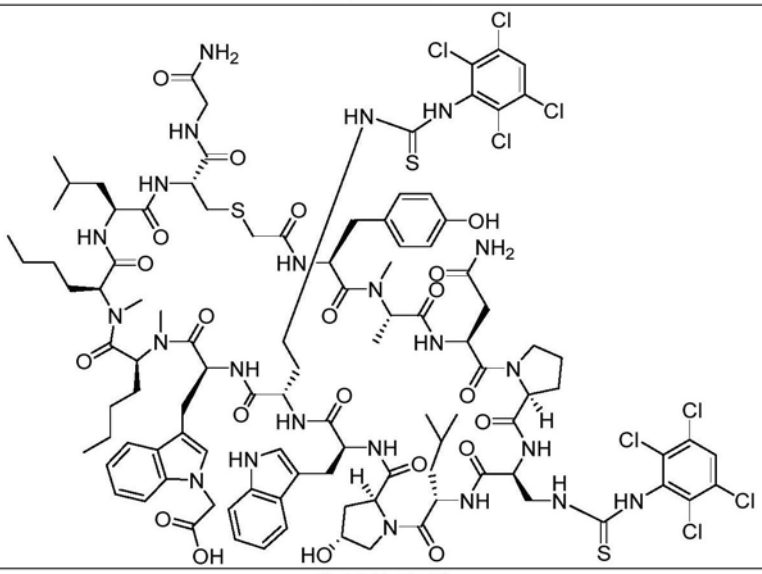
| 化合物1130 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1108 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1108 |
| 保留时间 | 1.70 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1131 |
| --- |
|  |
| **使用的试剂** |
| 起始材料 BMT-001 |

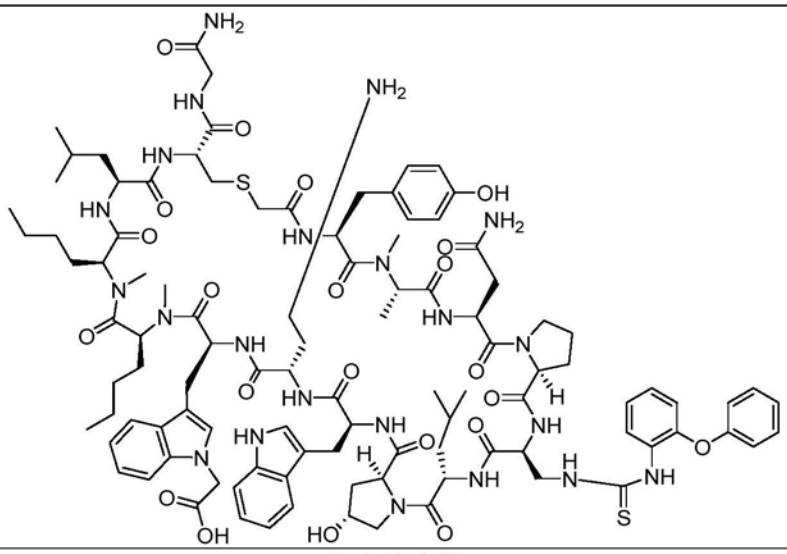
| | |
| --- | --- |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1026 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1026 |
| 保留时间 | 1.67 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1132 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1026 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1026 |
| 保留时间 | 1.66 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

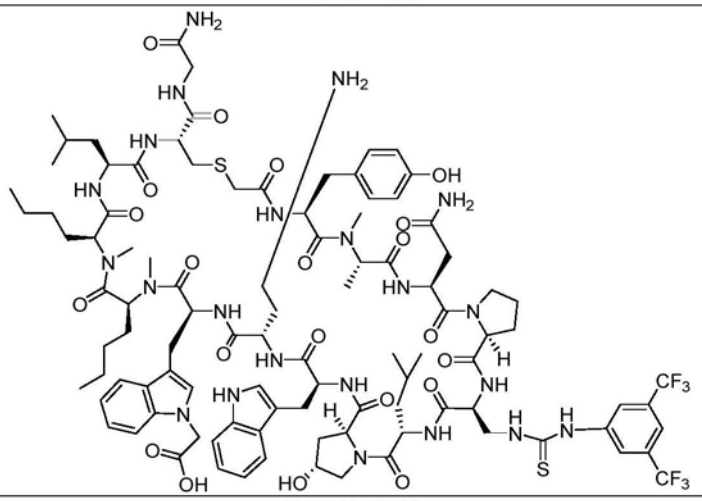
| 化合物1133 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-2-甲基-4-硝基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1033 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1033 |
| 保留时间 | 1.76 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

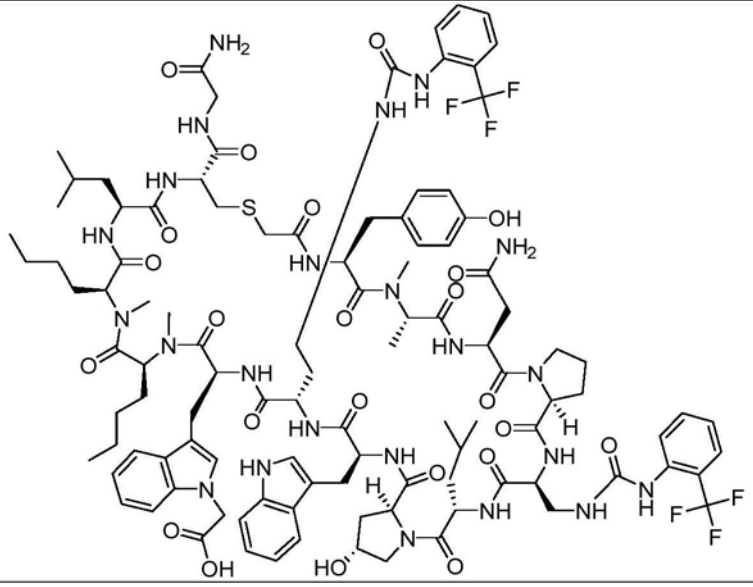
| 化合物1134 |
| --- |
|  |
| 使用的试剂 |

| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1,2,4,5-四氯-3-异硫氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 - H)$^+$计算值 | 1213 |
| MS (M/2 - H)$^+$实测值 | 1213 |
| 保留时间 | 2.03 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

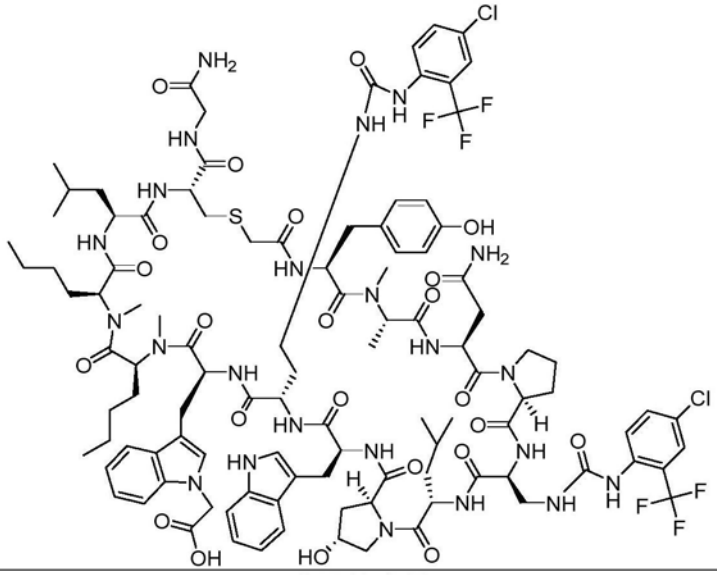
| 化合物1135 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-2-苯氧基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1058 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1058 |
| 保留时间 | 1.87 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |

| | |
|---|---|
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

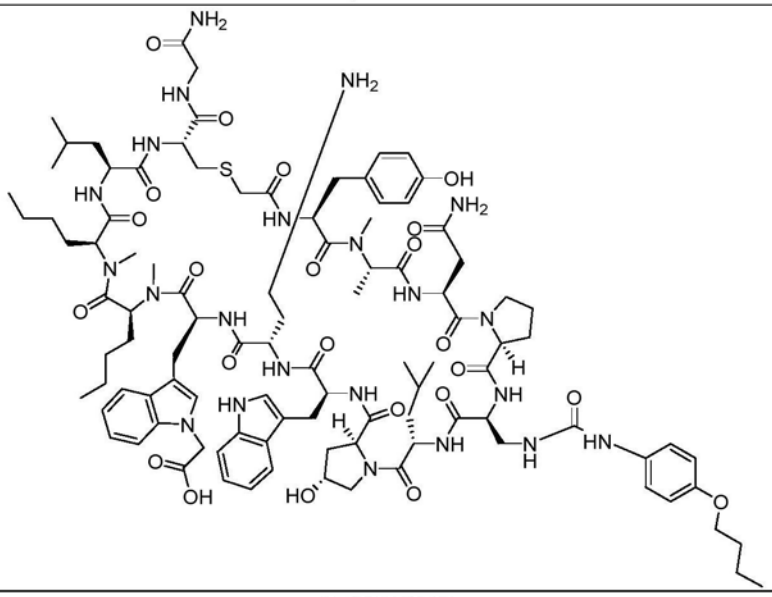
| 化合物1136 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基-3,5-双(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1079 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1079 |
| 保留时间 | 1.79 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

| 化合物1137 |
|---|
|  |

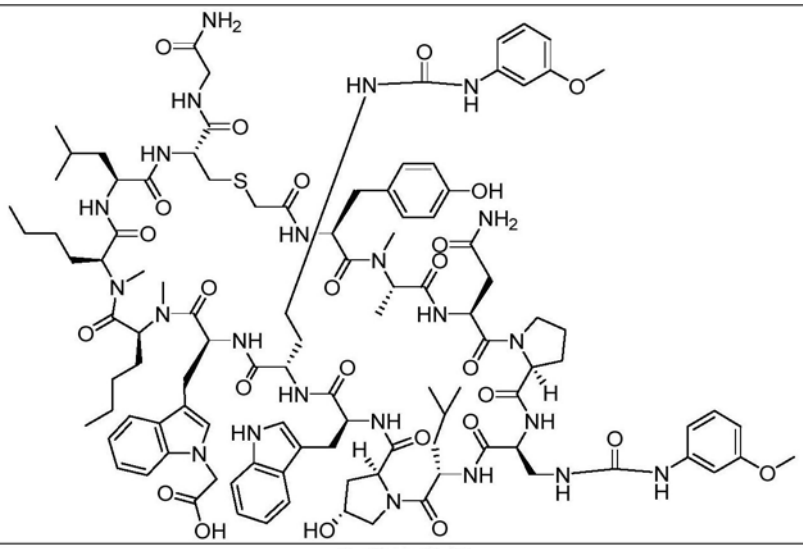
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-2-(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1131 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1131 |
| 保留时间 | 1.77 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1138 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-氯-1-异氰酰基-2-(三氟甲基)苯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1165 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1165 |
| 保留时间 | 1.93 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |

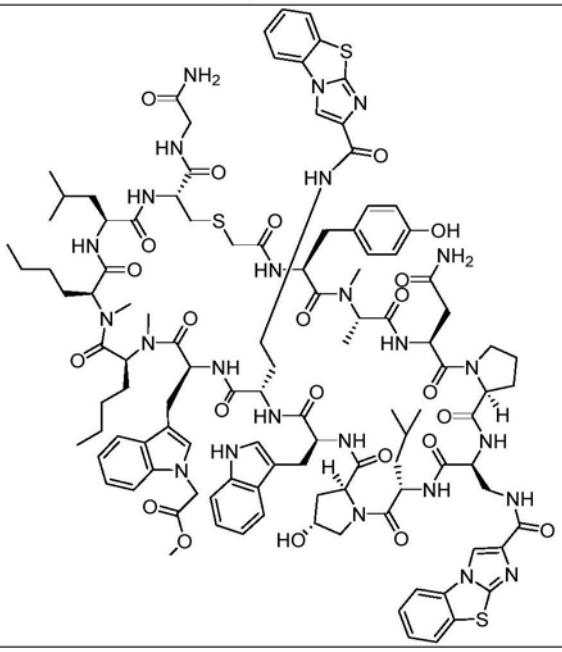
| | |
|---|---|
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物1139 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-丁氧基-4-异氰酸苯酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1040 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1040 |
| 保留时间 | 2.08 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

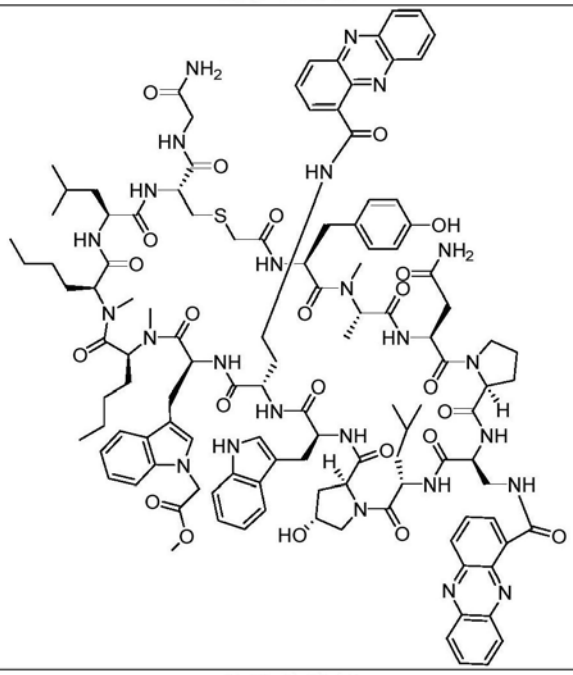
| 化合物1140 |
|---|



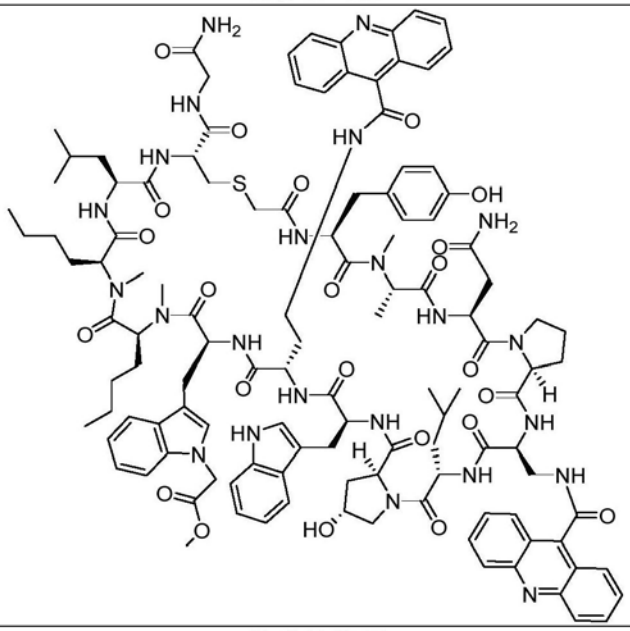
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基-3-甲氧基苯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1093 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1093 |
| 保留时间 | 1.76 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物2001 |
| --- |
|  |

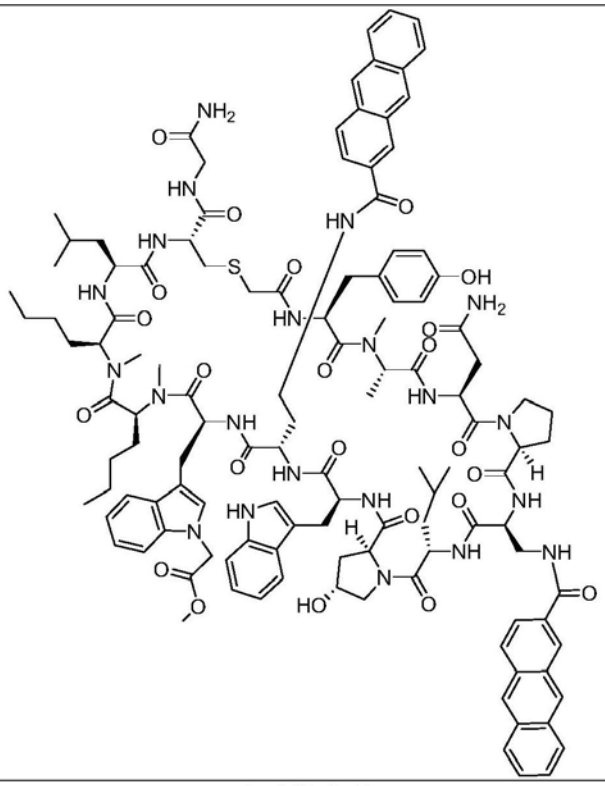
| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 咪唑并[2,1-B][1,3]苯并噻唑-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1151 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1151 |
| 保留时间 | 2.14 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2002 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 吩嗪-1-甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1157 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1157 |
| 保留时间 | 2.18 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |

| | |
|---|---|
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

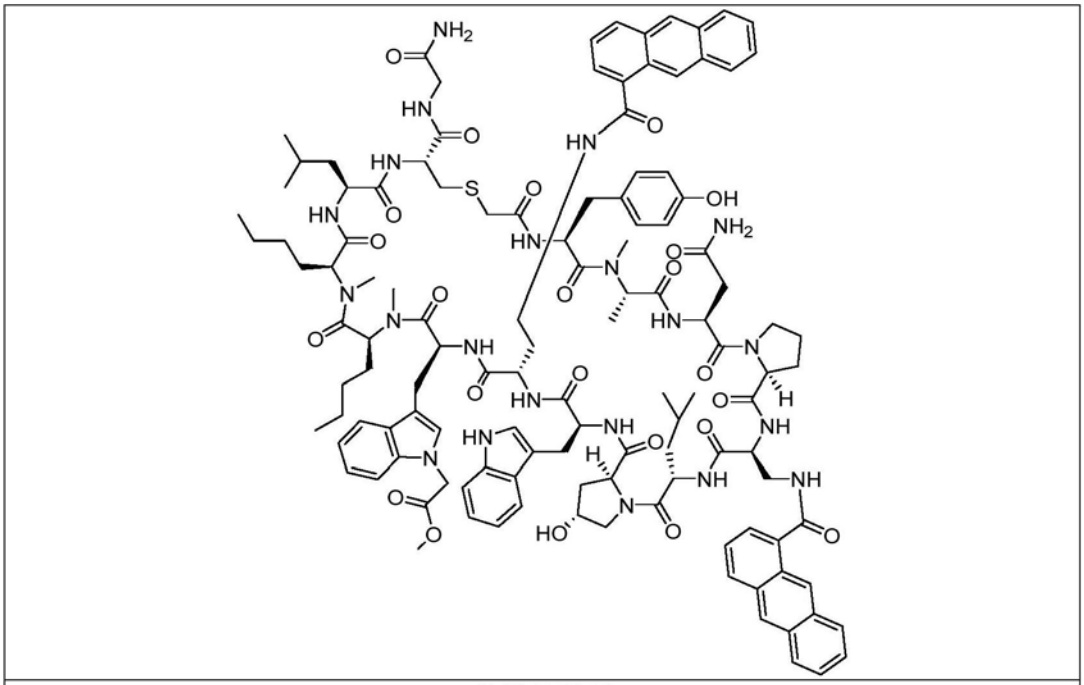
| 化合物2003 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 9-吖啶甲酸水合物 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1156 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1156 |
| 保留时间 | 2.09 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2004 |
|---|



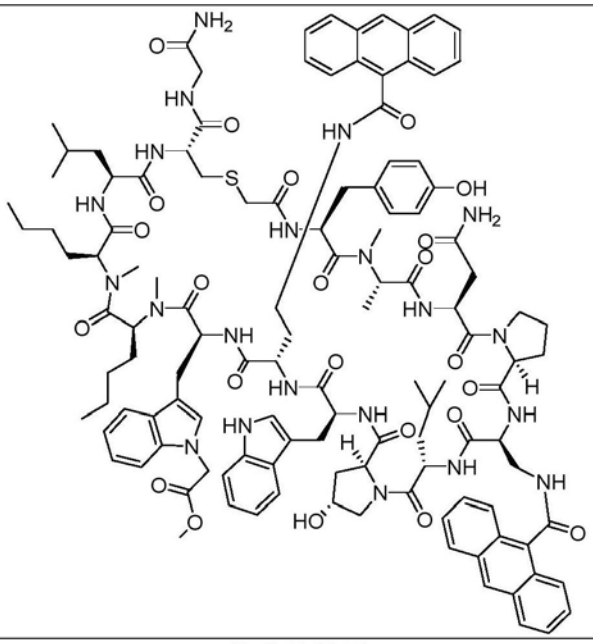
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 2-蒽甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1155 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1155 |
| 保留时间 | 2.43 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | UPLC BEH C18, 2.1 x 50 mm, 1.7-µm颗粒 |

| 化合物2005 |
|---|



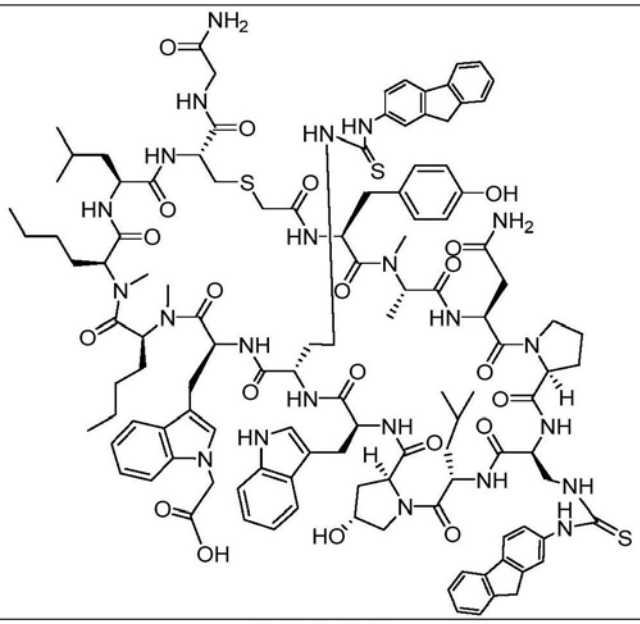
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 1-蒽甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1155 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1155 |
| 保留时间 | 2.38 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2006 |
|---|



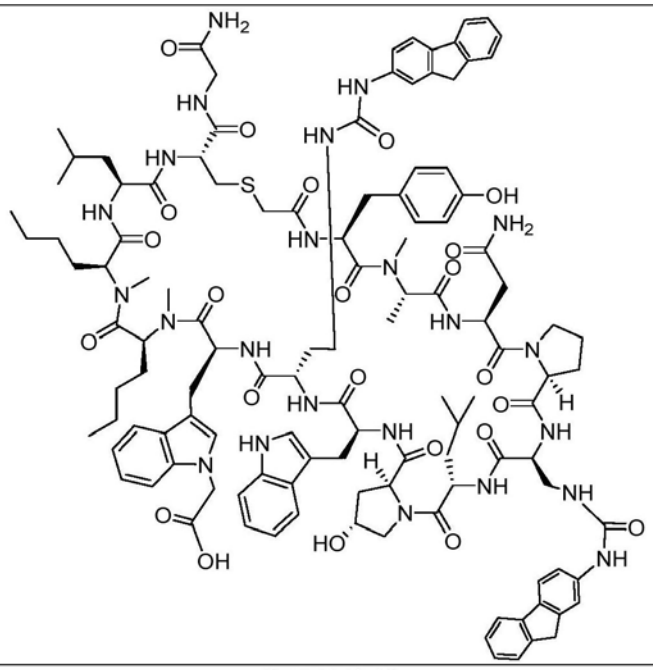
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 9-蒽甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1155 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1155 |
| 保留时间 | 2.35 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 µm颗粒 |

| 化合物2007 |
|---|



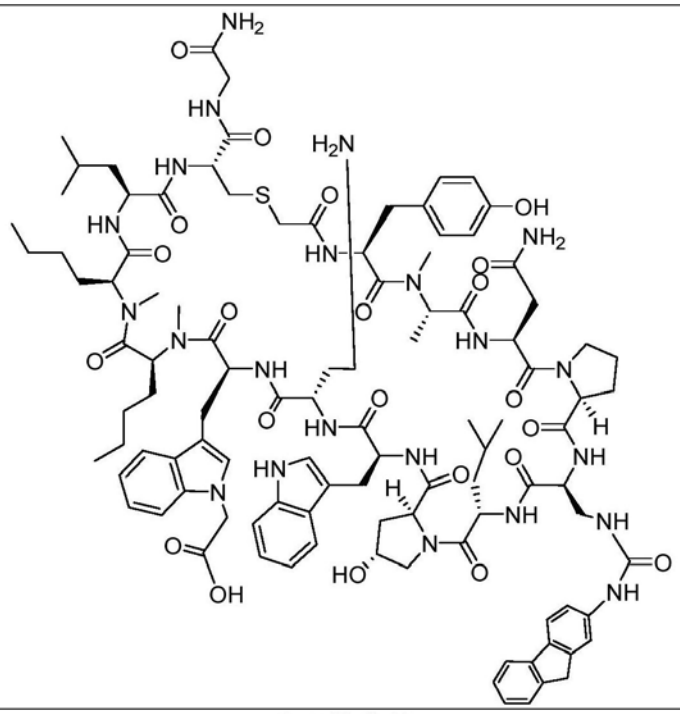
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基-9H-芴 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1167 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1167 |
| 保留时间 | 2.06 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2008 |
|---|



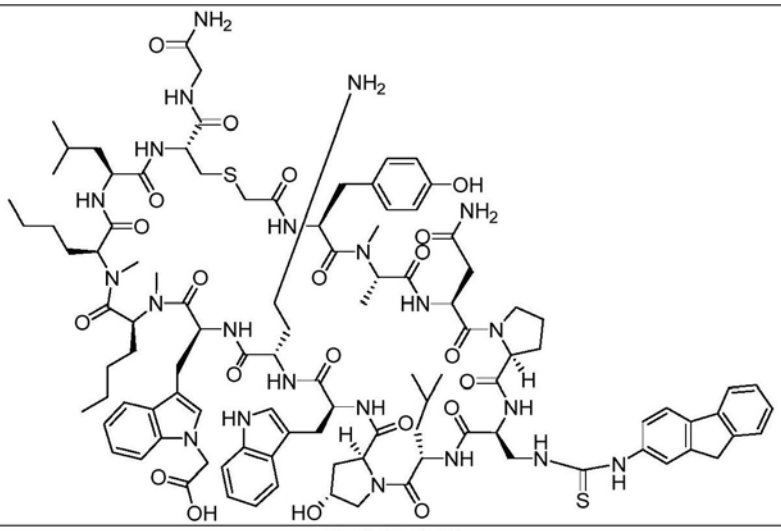
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基-9H-芴 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1151 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1151 |
| 保留时间 | 1.93 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2009 |
|---|

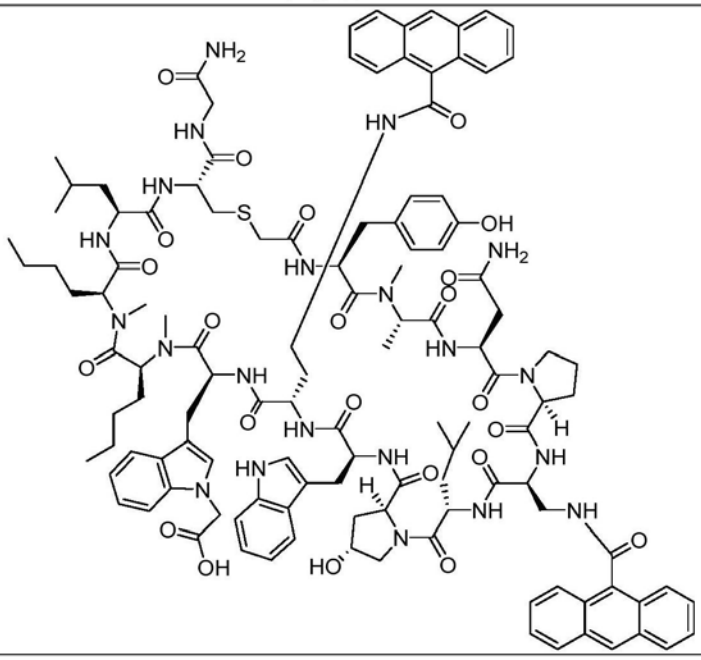


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基-9H-芴 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1048 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1048 |
| 保留时间 | 1.81 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

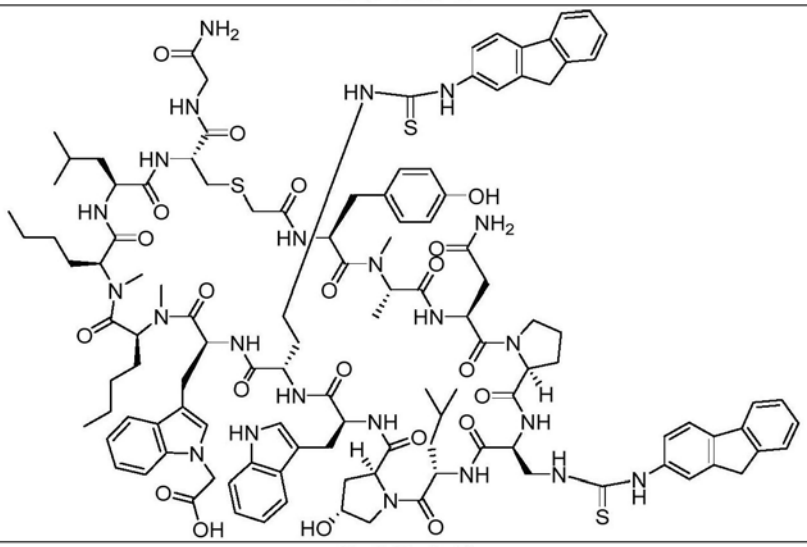
| 化合物2010 |
|---|



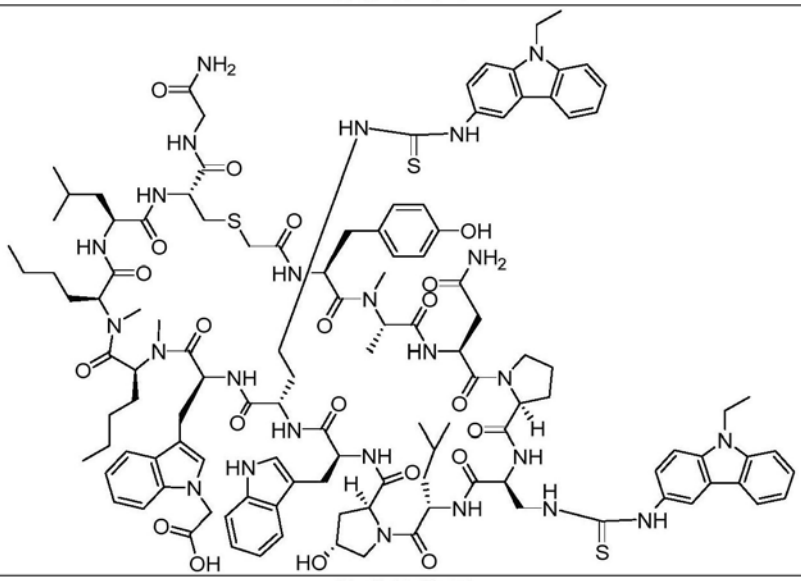
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基-9H-芴 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1056 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1056 |
| 保留时间 | 1.85 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2011 |
| --- |
|  |

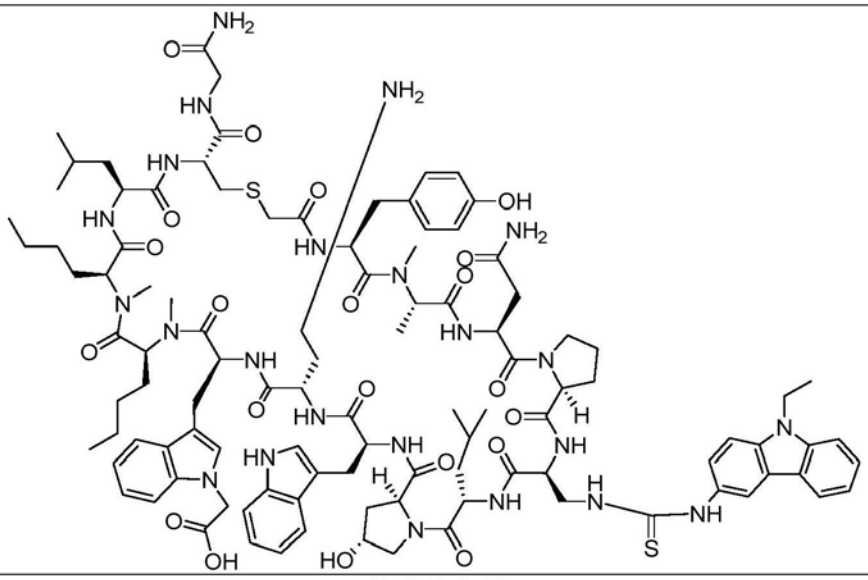
| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 蒽-9-甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1148 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1148 |
| 保留时间 | 1.90 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2012 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基-9H-芴 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1167 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1167 |
| 保留时间 | 2.08 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |

| | |
|---|---|
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

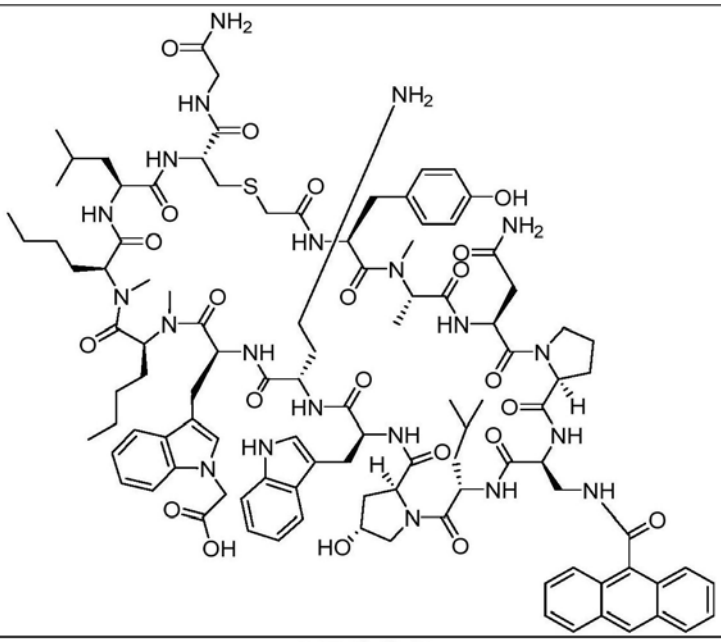
| 化合物2013 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 9-乙基-3-异硫氰酰基-9H-咔唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1196 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1196 |
| 保留时间 | 2.04 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2014 |
|---|



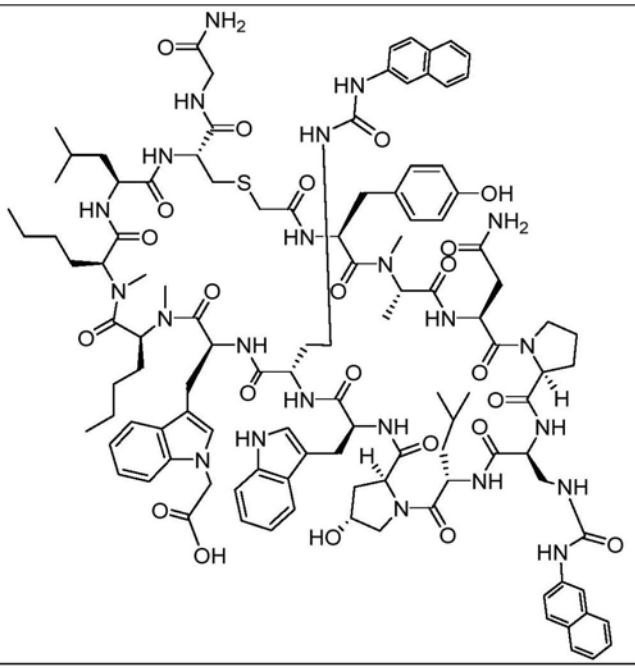
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 9-乙基-3-异硫氰酰基-9H-咔唑 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1070 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1070 |
| 保留时间 | 2.04 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物2015 |
|---|



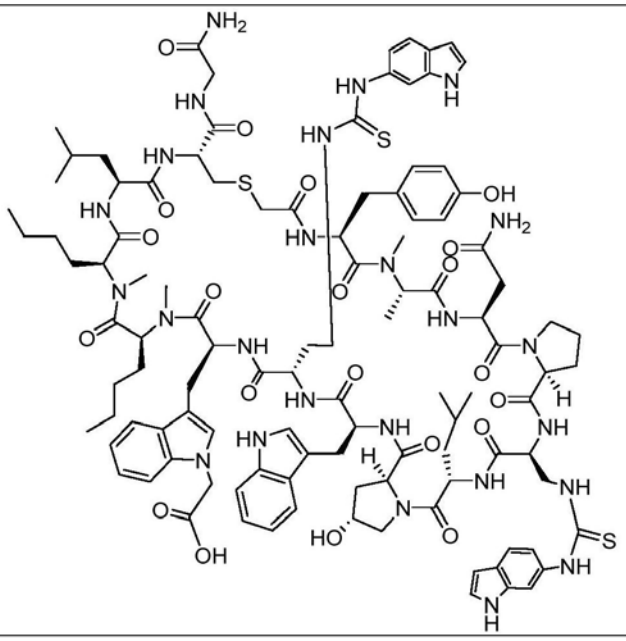
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 蒽-9-甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1046 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1046 |
| 保留时间 | 1.79 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters BEH C18, 2.1 x 50 mm, 1.7-μm颗粒; |

| 化合物3001 |
|---|



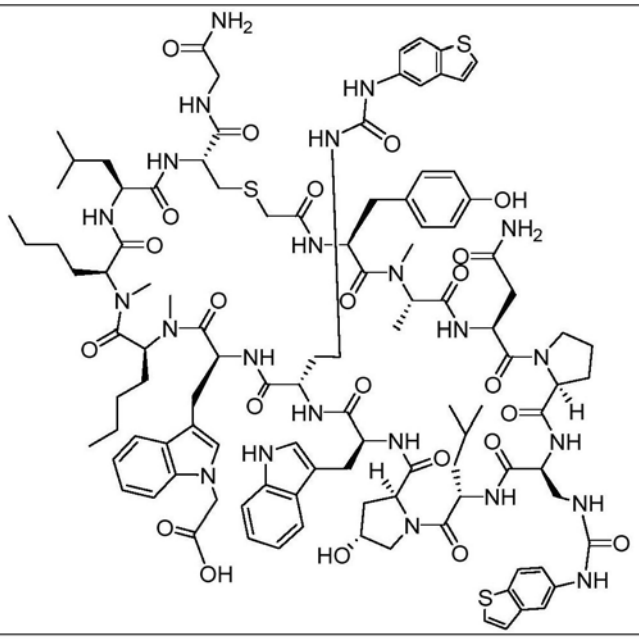
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1113 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1113 |
| 保留时间 | 2.08 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

**化合物3002**



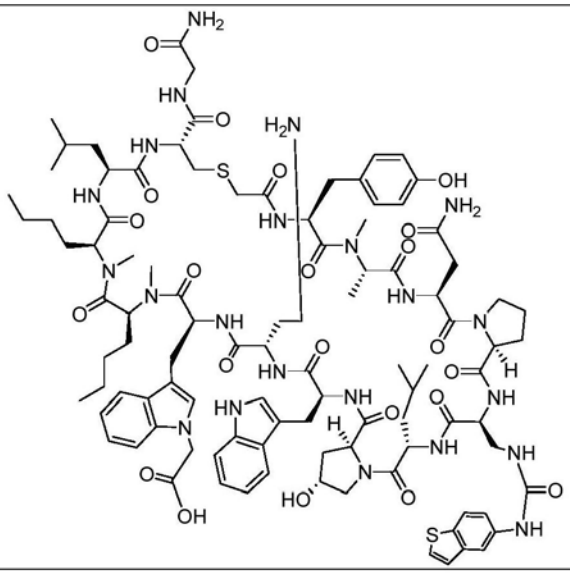
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异硫氰酰基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1118 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1118 |
| 保留时间 | 1.60 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

**化合物3003**

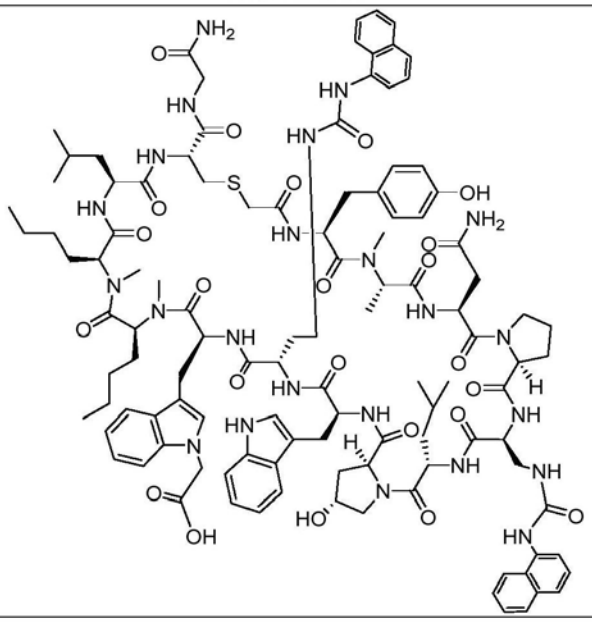


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异氰酰基苯并[b]噻吩 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1119 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1119 |
| 保留时间 | 1.74 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

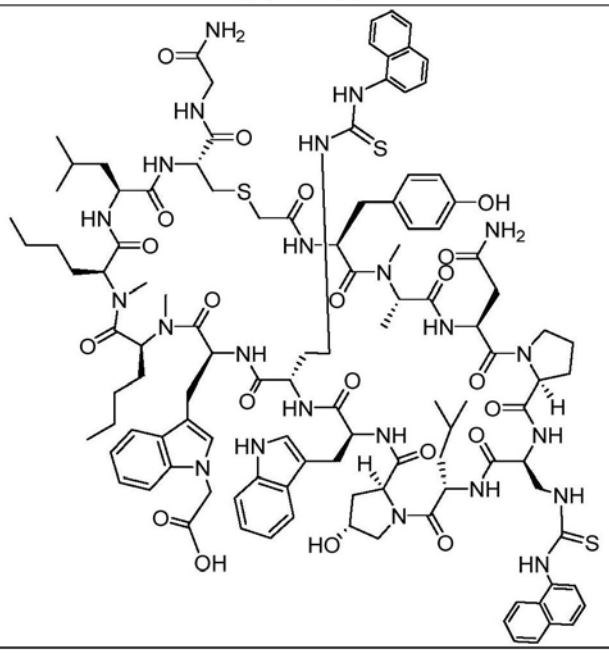
**化合物3004**



| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异氰酰基苯并[b]噻吩 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1119 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1119 |
| 保留时间 | 1.89 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

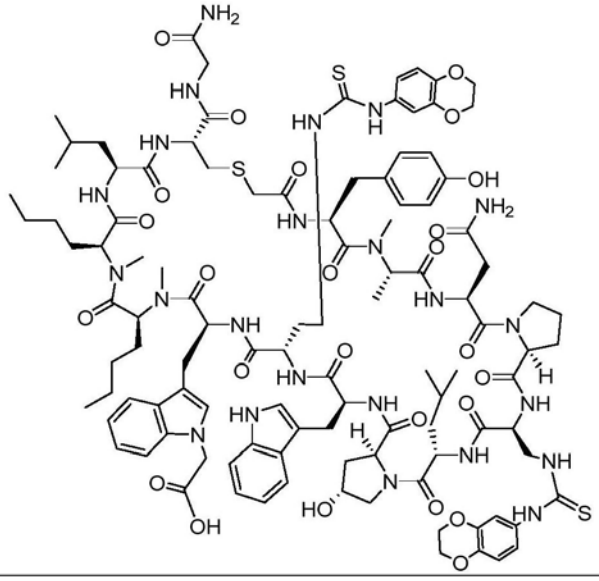
| 化合物3005 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1113 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1113 |
| 保留时间 | 1.98 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters BEH C18, 2.1 x 50 mm, 1.7-μm颗粒 |

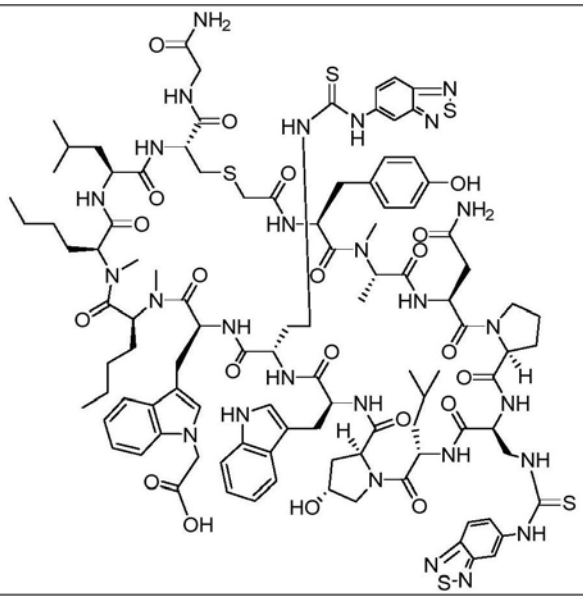
| 化合物3006 |
| --- |
|  |

| **使用的试剂** | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1129 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1129 |
| 保留时间 | 1.99 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |

| | |
| --- | --- |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

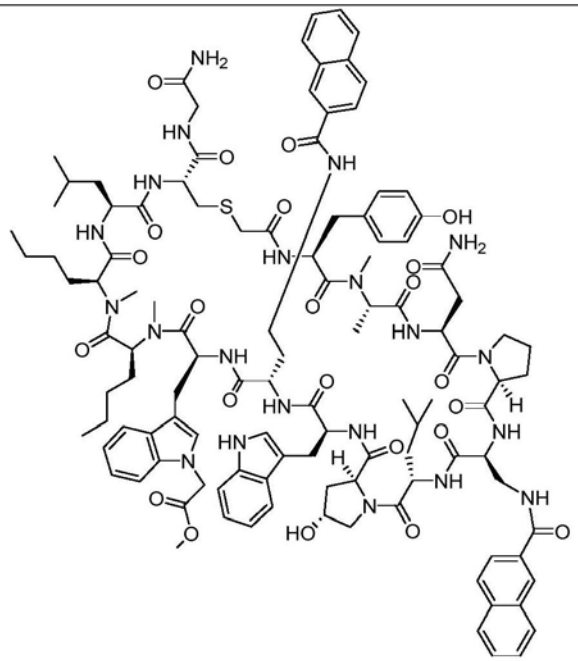
| 化合物3007 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异硫氰酰基-2,3-二氢苯并[b][1,4]二噁英 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1137 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1137 |
| 保留时间 | 1.86 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3008 |
|---|



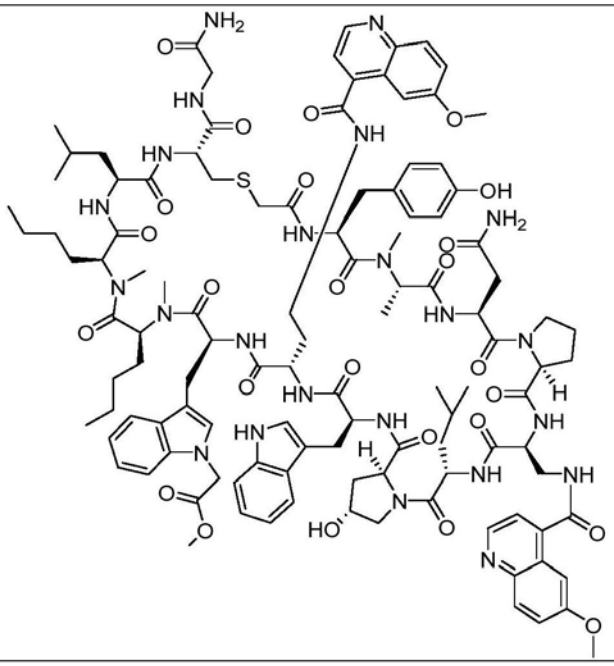
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基苯并[c][1,2,5]噻二唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1137 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1137 |
| 保留时间 | 1.96 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3009 |
|---|



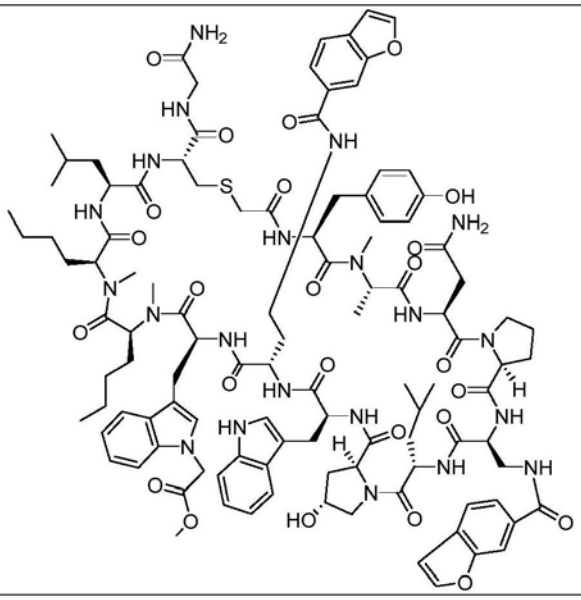
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 2-萘甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1105 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1105 |
| 保留时间 | 2.20 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3010 |
|---|



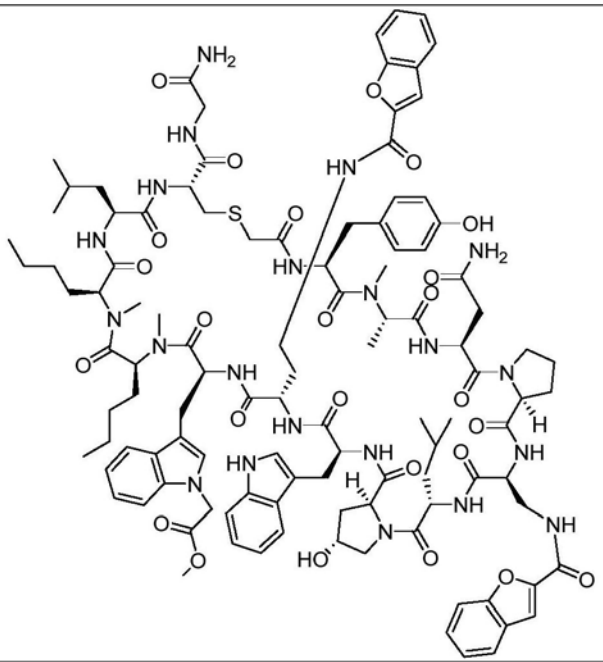
| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 6-甲氧基-4-喹啉甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1136 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1136 |
| 保留时间 | 2.90 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 10 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 4 min |
| 流速 | 0.8 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 50x2, 3u |

**化合物3011**



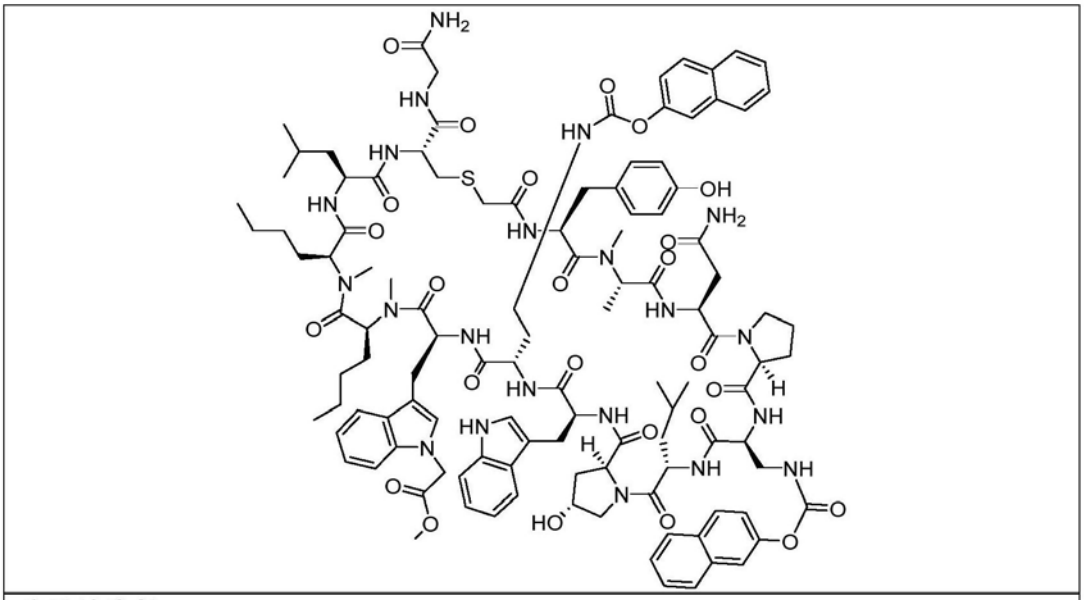
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 苯并呋喃-6-甲酸 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1095 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1095 |
| 保留时间 | 3.14 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 10 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 4 min |
| 流速 | 0.8 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 50x2, 3u |

**化合物3012**

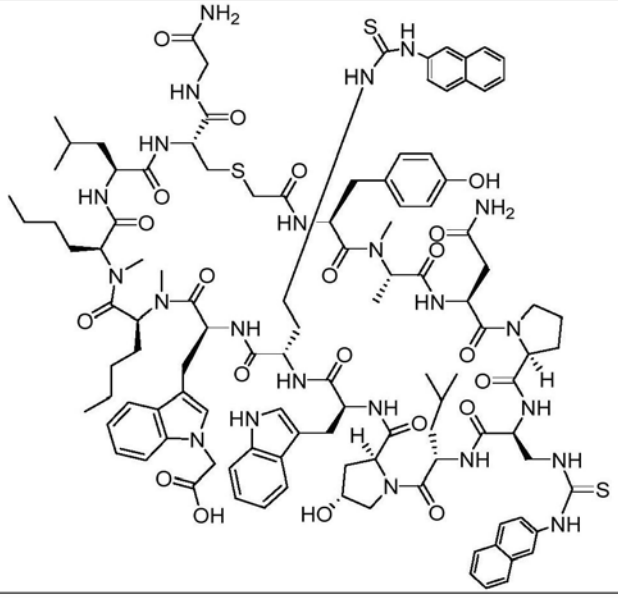


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 苯并呋喃-2-甲酸 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1095 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1095 |
| 保留时间 | 2.69 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 20 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 4 min |
| 流速 | 0.8 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 50x2, 3u |

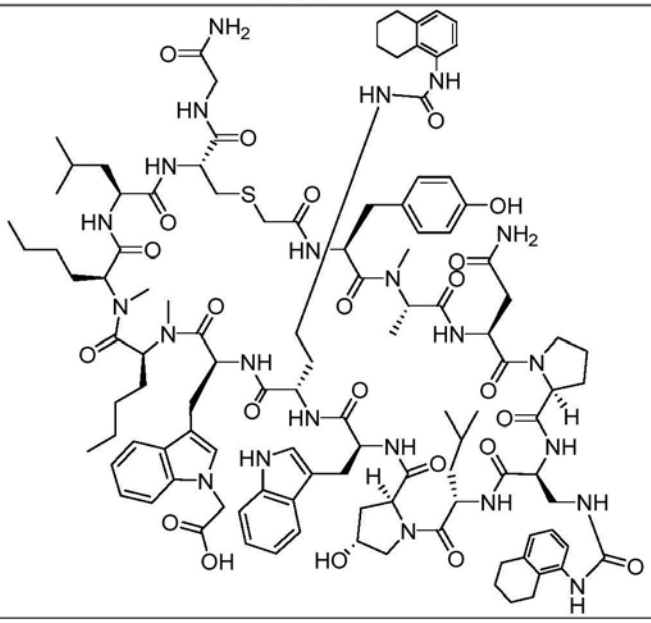
| 化合物3013 |
|---|



| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 氯甲酸2-萘酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1121 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1121 |
| 保留时间 | 2.29 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

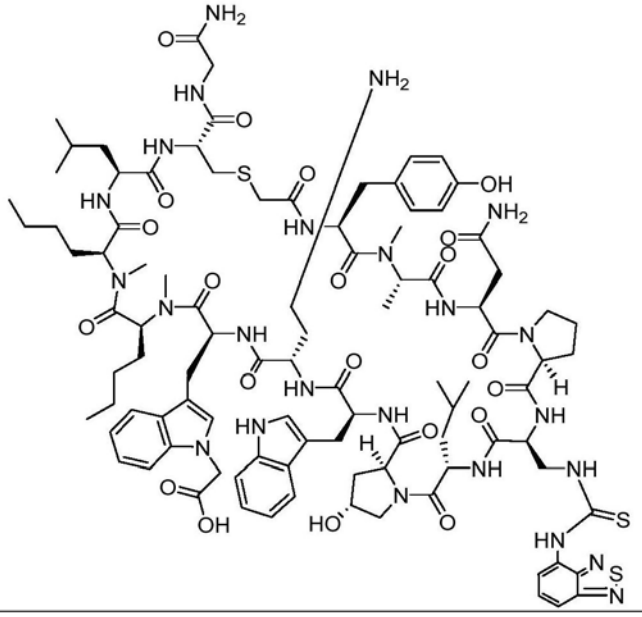
| 化合物3014 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1129 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1129 |
| 保留时间 | 2.16 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

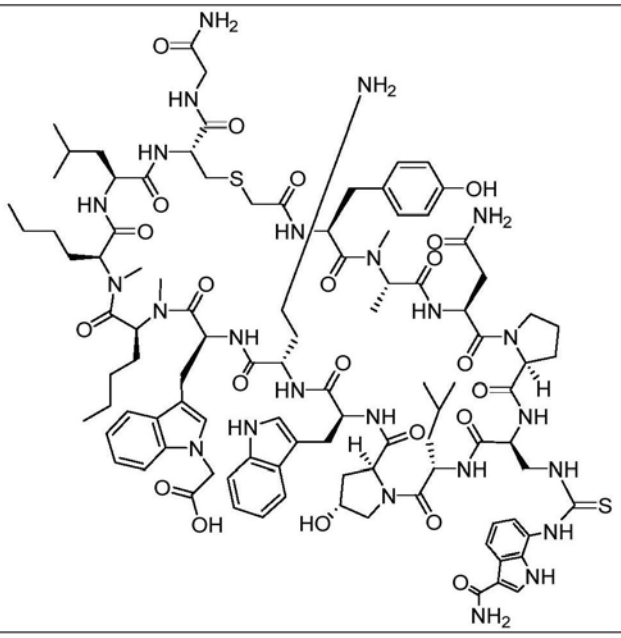
| 化合物3015 |
|---|
|  |

| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异氰酰基-1,2,3,4-四氢萘 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1117 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1117 |
| 保留时间 | 2.15 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |

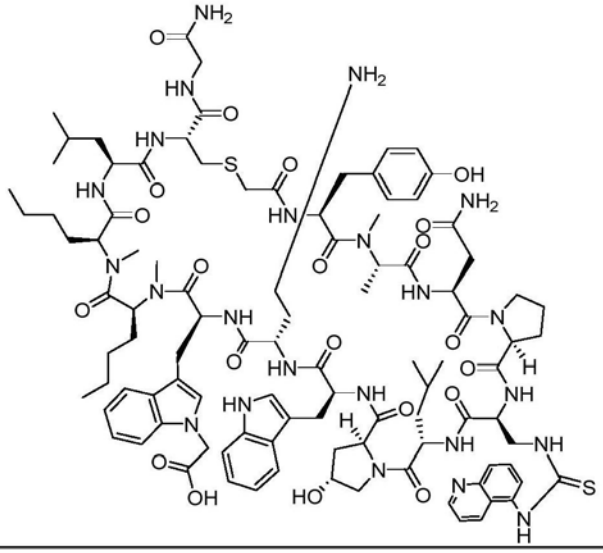
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |
|---|---|

| 化合物3016 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-异硫氰酰基苯并[c][1,2,5]噻二唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1040 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1040 |
| 保留时间 | 1.94 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

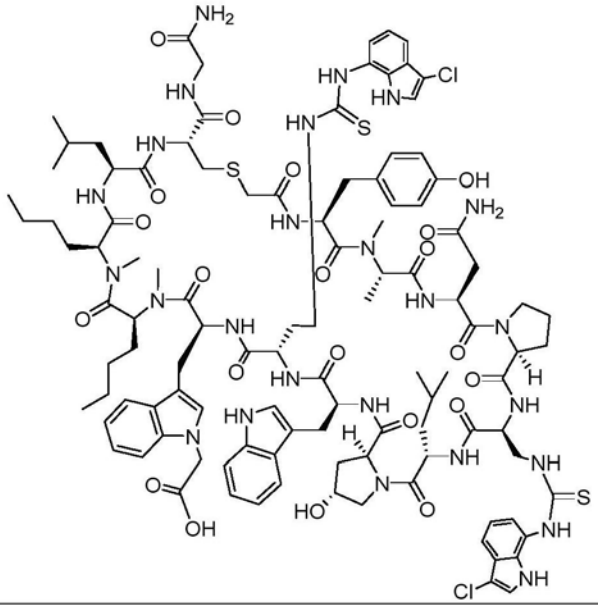
| 化合物3017 |
|---|



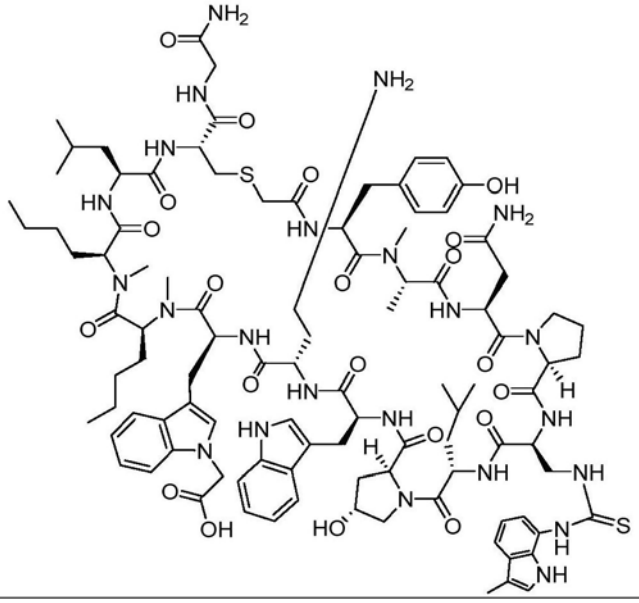
| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-1H-吲哚-3-甲酰胺 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1052 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1052 |
| 保留时间 | 1.78 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3018 |
| --- |
|  |
| **使用的试剂** |

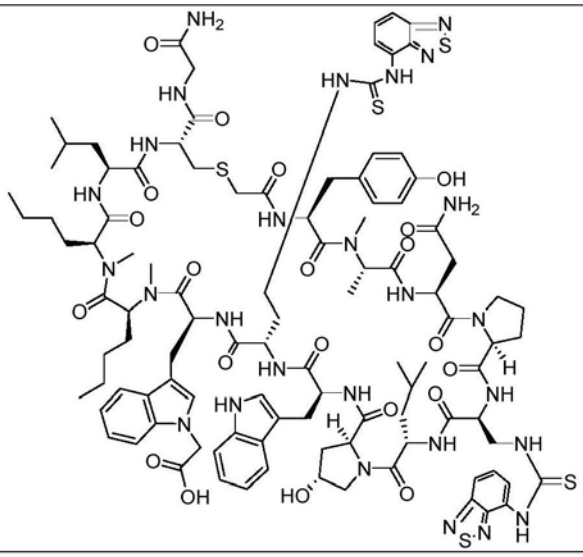
| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基喹啉 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1037 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1037 |
| 保留时间 | 1.84 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3019 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 3-氯-7-异硫氰酰基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1152 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1152 |
| 保留时间 | 1.98 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |

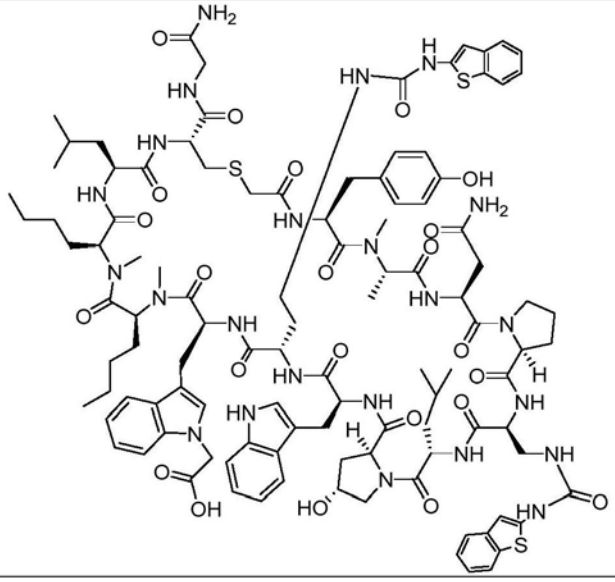
| | |
|---|---|
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3020 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-3-甲基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1038 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1038 |
| 保留时间 | 1.83 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70 ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

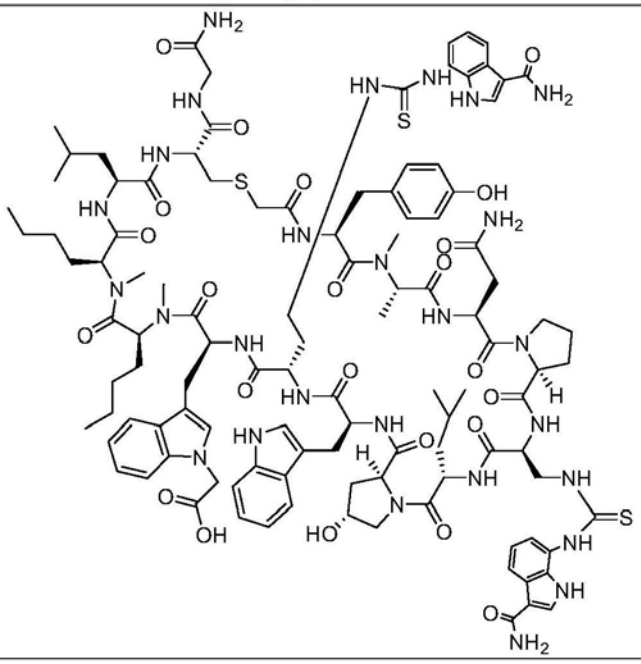
| 化合物3021 |
|---|



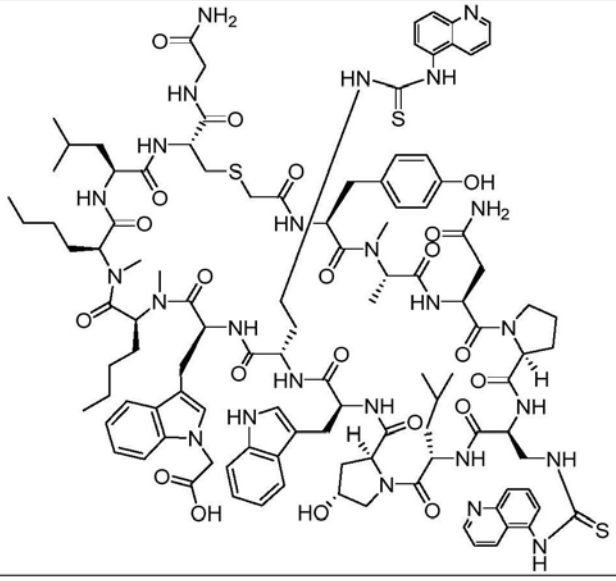
| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-异硫氰酰基苯并[c][1,2,5]噻二唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1137 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1137 |
| 保留时间 | 1.83 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3022 |
| --- |
|  |
| **使用的试剂** |

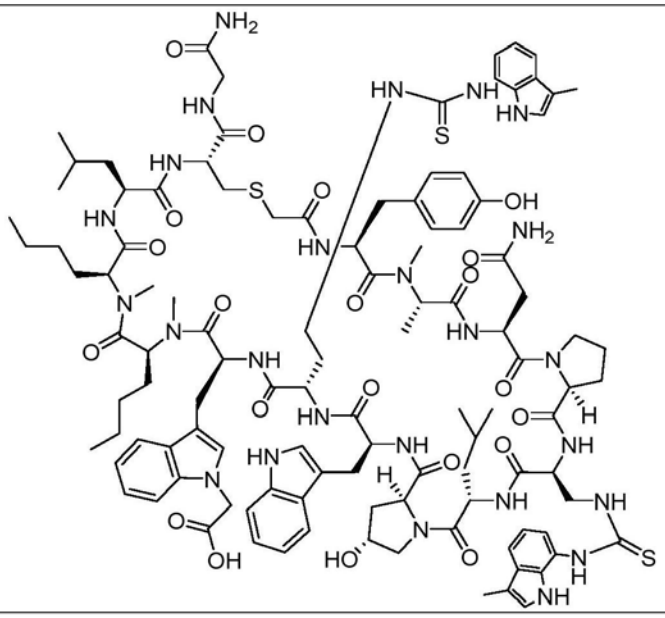
| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基苯并[b]噻吩 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1119 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1119 |
| 保留时间 | 2.07 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70 ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 µm颗粒 |

| 化合物3023 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-1H-吲哚-3-甲酰胺 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1161 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1161 |
| 保留时间 | 1.56 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |

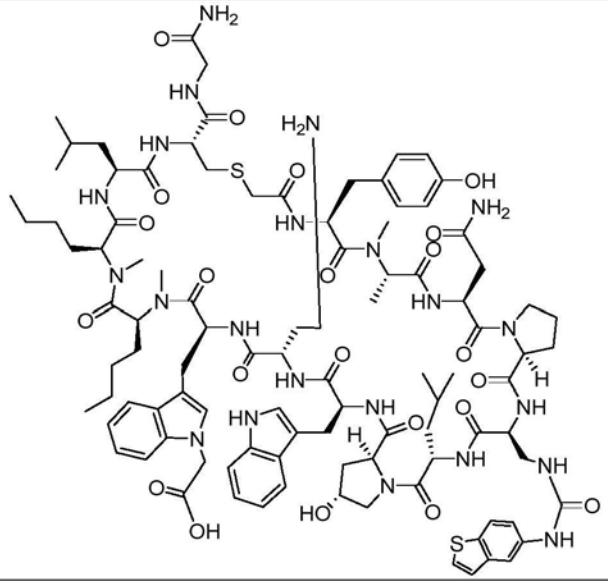
| | |
|---|---|
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3024 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基喹啉 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1130 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1130 |
| 保留时间 | 1.59 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

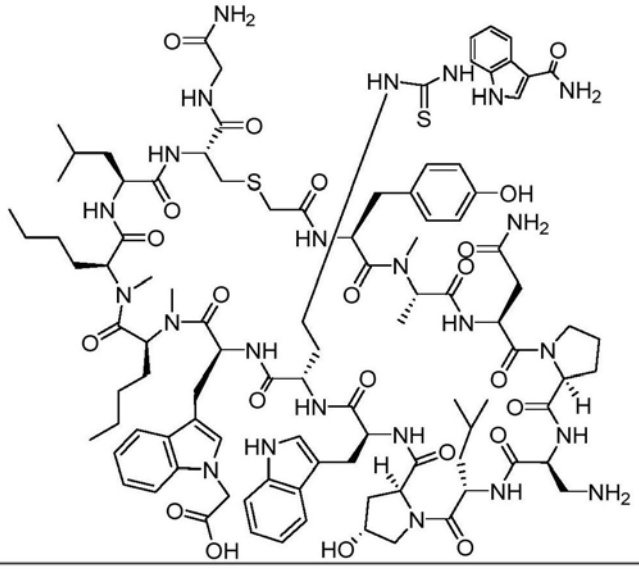
| 化合物3025 |
|---|



| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-3-甲基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1132 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1132 |
| 保留时间 | 2.05 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Acquity BEH C18 2.1 x 50 mm; 1.7 um |

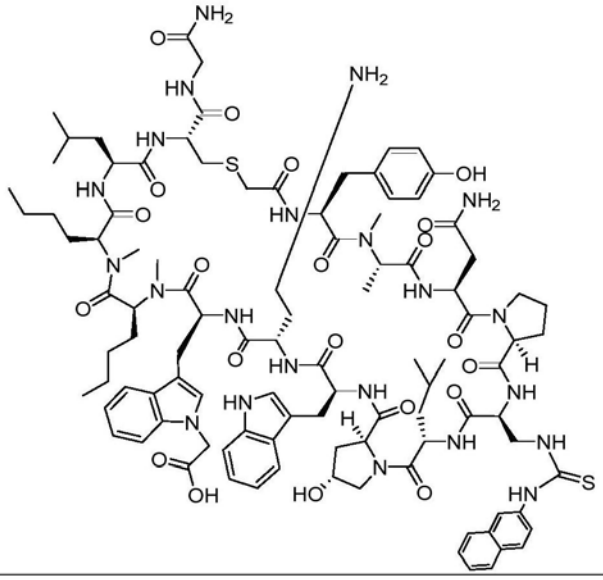
| 化合物3026 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异氰酰基苯并[b]噻吩 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1031 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1031 |
| 保留时间 | 1.79 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

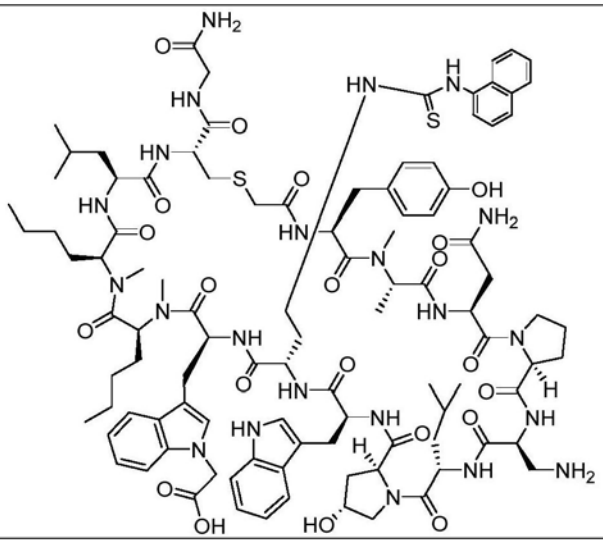
| 化合物3027 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-1H-吲哚-3-甲酰胺 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1052 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1052 |
| 保留时间 | 1.56 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |

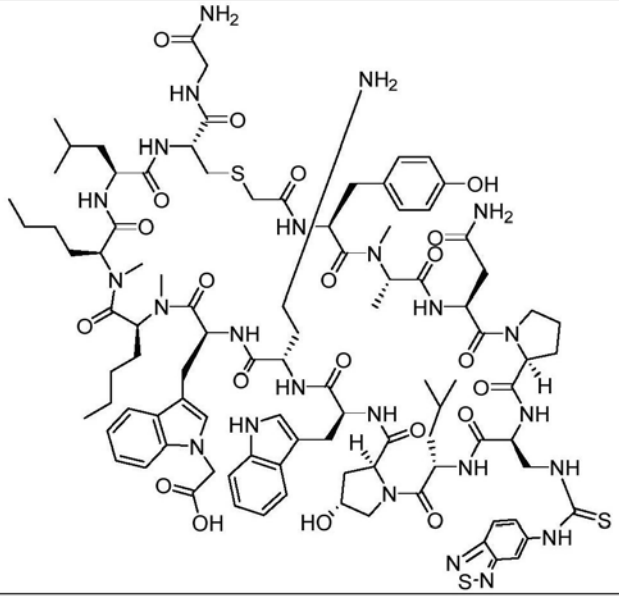
| 温度 | 70℃ |
| --- | --- |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3028 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1036 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1036 |
| 保留时间 | 1.84 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

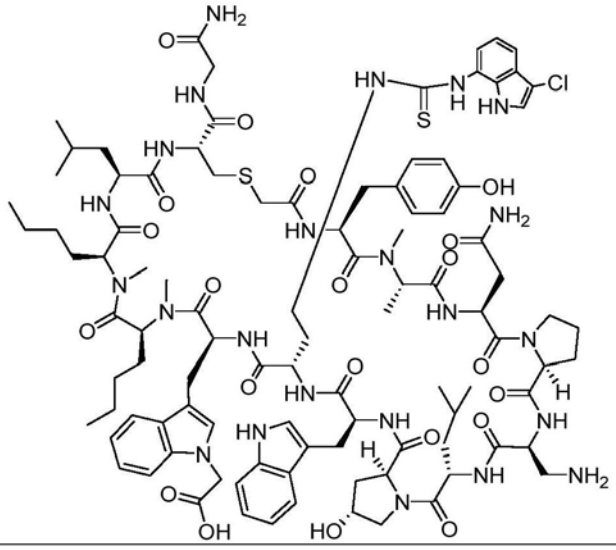
| 化合物3029 |
|---|

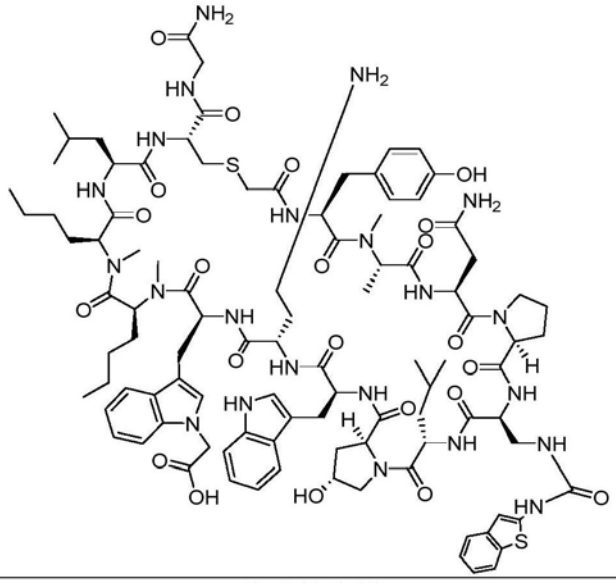


| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1036 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1036 |
| 保留时间 | 1.80 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

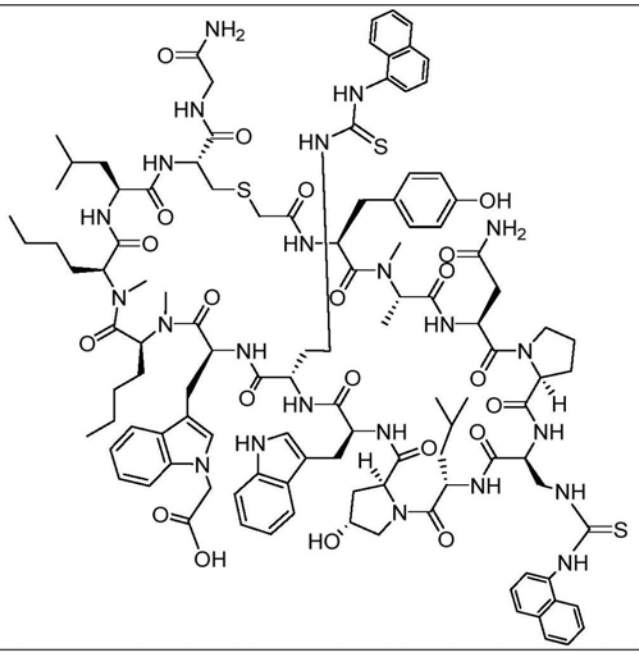
| 化合物3030 |
| --- |
|  |
| **使用的试剂** |

| | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基苯并[c][1,2,5]噻二唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1040 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1040 |
| 保留时间 | 1.77 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3031 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 3-氯-7-异硫氰酰基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1048 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1048 |
| 保留时间 | 1.86 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

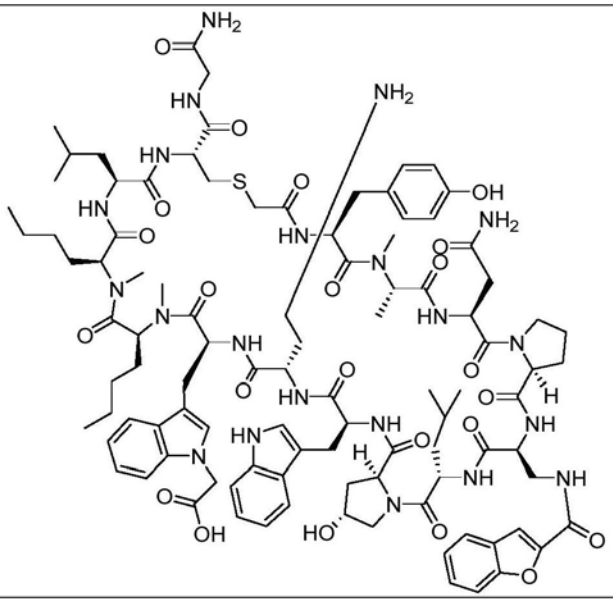
| 化合物3032 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基苯并[b]噻吩 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1031 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1031 |
| 保留时间 | 1.83 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3033 |
|---|



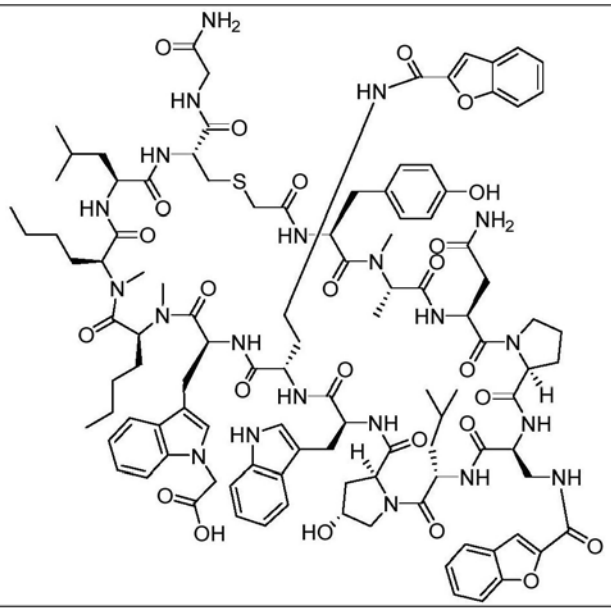
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异硫氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1129 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1129 |
| 保留时间 | 1.86 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

**化合物3034**



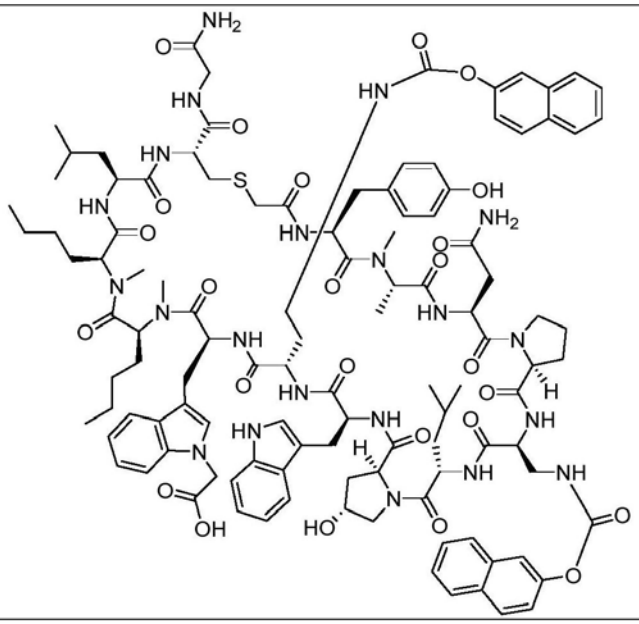
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 苯并呋喃-2-碳酰氯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1016 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1016 |
| 保留时间 | 1.75 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

**化合物3036**

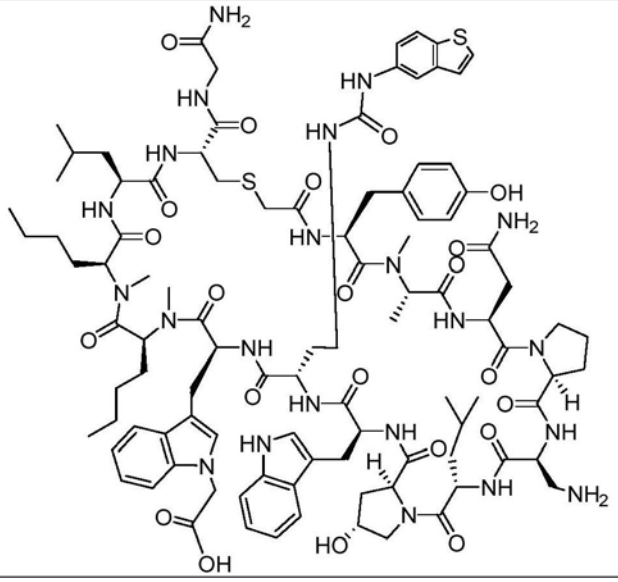


| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 苯并呋喃-2-碳酰氯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1088 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1088 |
| 保留时间 | 1.77 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

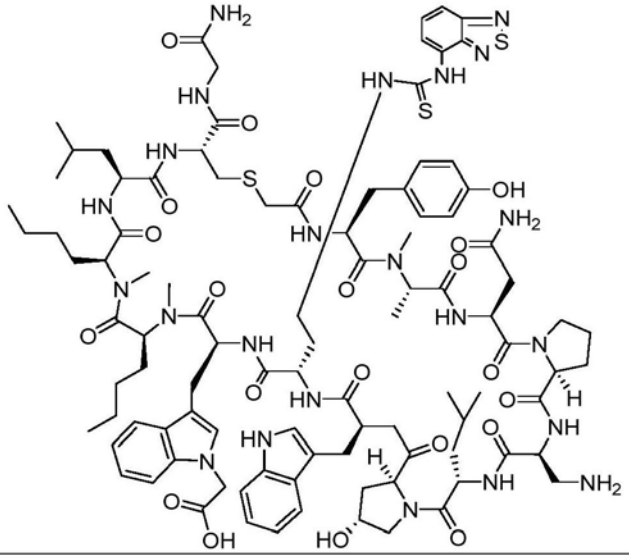
**化合物3037**



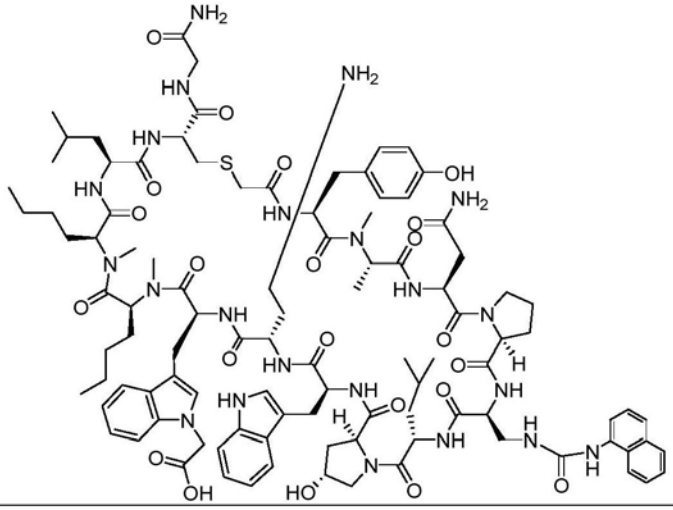
| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 萘-2-基氯甲酸酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1114 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1114 |
| 保留时间 | 1.92 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

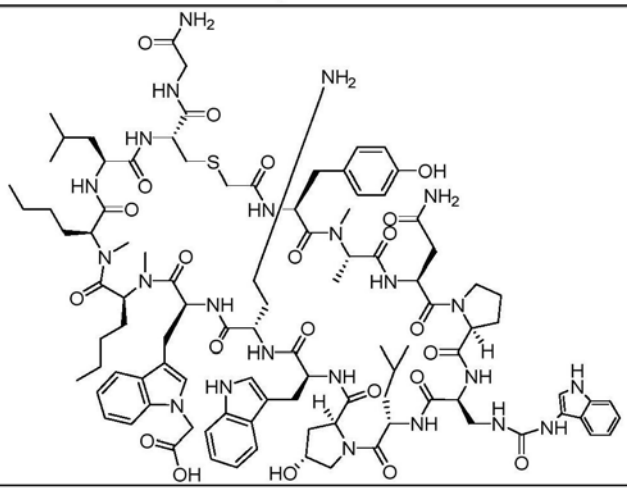
| 化合物3038 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异氰酰基苯并[b]噻吩 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1031 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1031 |
| 保留时间 | 1.81 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

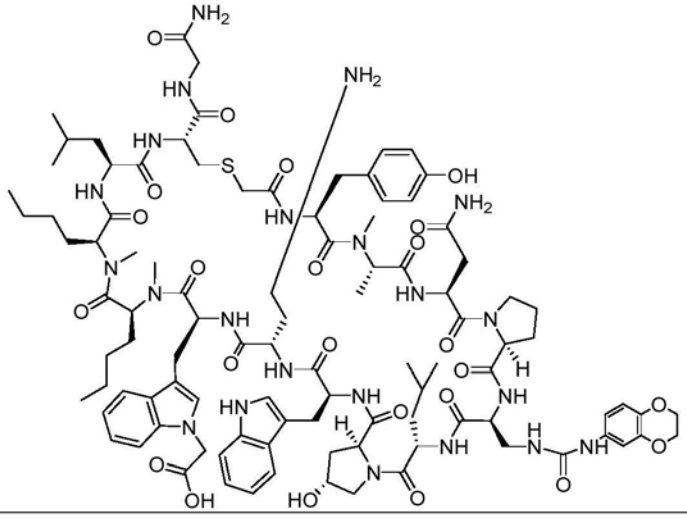
| 化合物3039 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-异硫氰酰基苯并[c][1,2,5]噻二唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1040 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1040 |
| 保留时间 | 1.80 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |

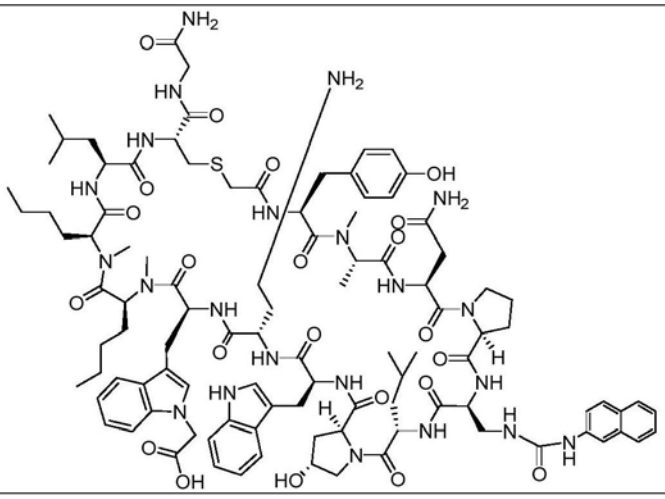
| | |
|---|---|
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

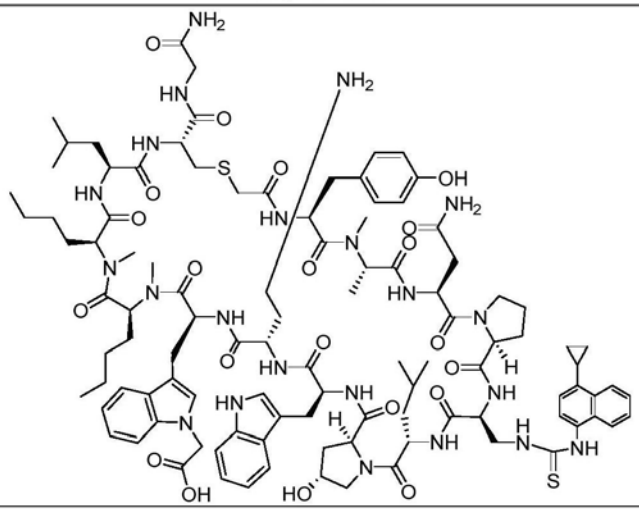
| 化合物3040 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-异氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1029 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1029 |
| 保留时间 | 1.72 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3041 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |

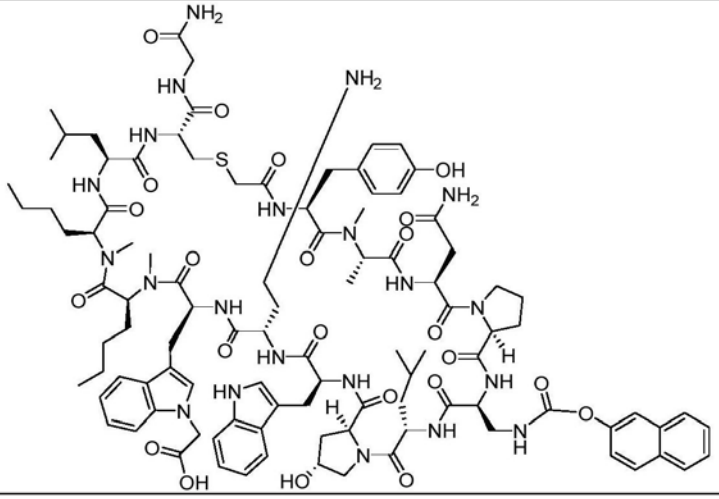
| | |
|---|---|
| 亲电子试剂 | 3-异氰酰基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1023 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1023 |
| 保留时间 | 1.59 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| **化合物3042** | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异氰酰基-2,3-二氢苯并[b][1,4]二噁英 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1033 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1033 |
| 保留时间 | 1.55 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

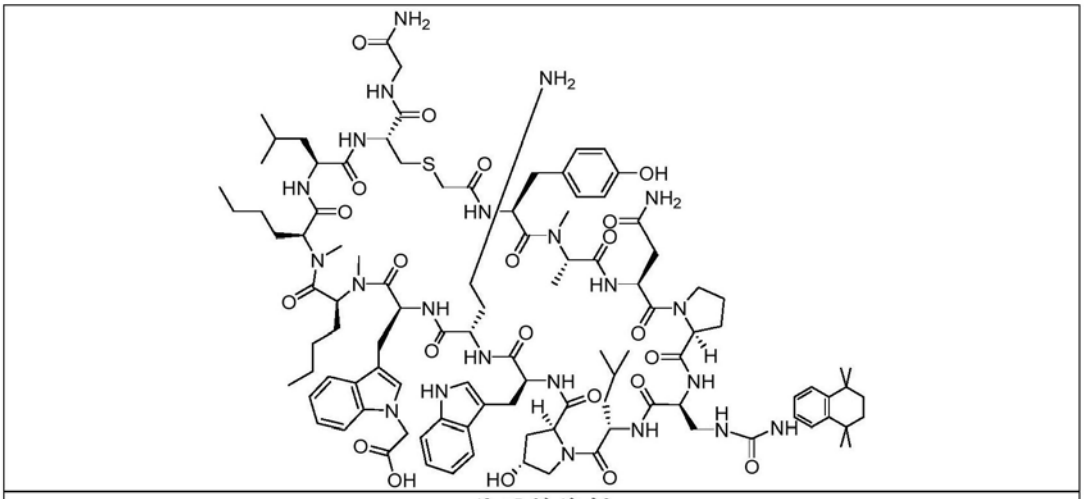
| 化合物3043 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1029 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1029 |
| 保留时间 | 1.54 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

| 化合物3044 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-环丙基-4-异硫氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1057 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1057 |

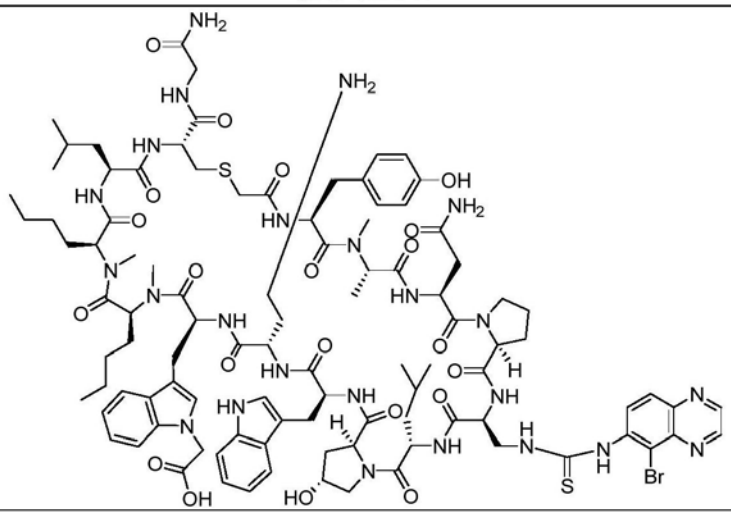
| | |
|---|---|
| 保留时间 | 1.71 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

| 化合物3045 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 萘-2-基氯甲酸酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1029 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1029 |
| 保留时间 | 1.67 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

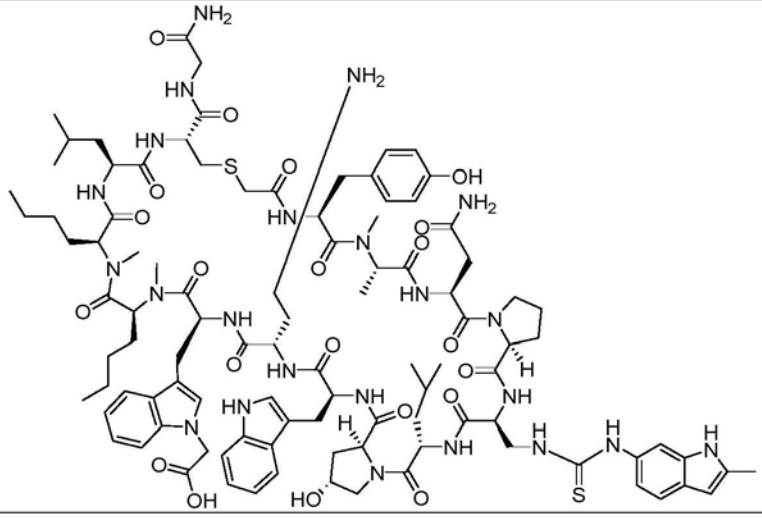
| 化合物3046 |
|---|



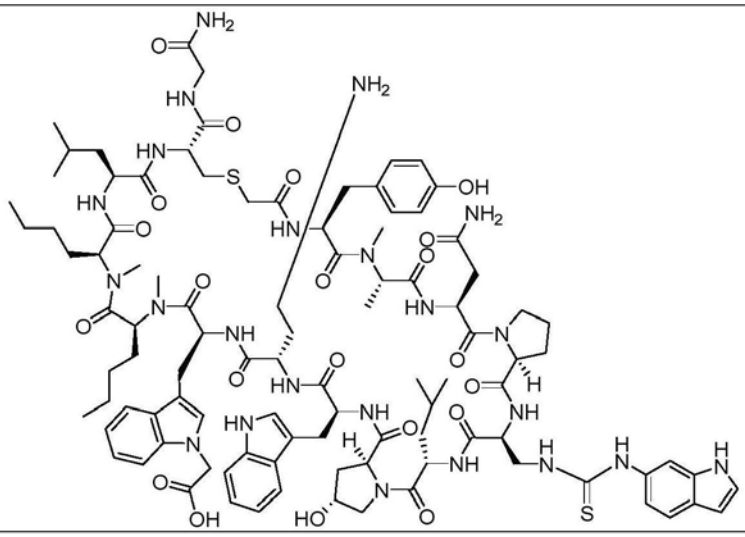
| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异氰酰基-1,1,4,4-四甲基-1,2,3,4-四氢萘 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1059 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1059 |
| 保留时间 | 1.75 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5% ACN : 95%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 溶剂B | 95 % ACN : 5%水 ：10 mM乙酸铵 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 2 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 40ºC |
| 柱 | Phenomenex LUNA C18, 30x2, 3u |

| 化合物3047 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-溴-6-异硫氰酰基喹喔啉 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1076 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1076 |

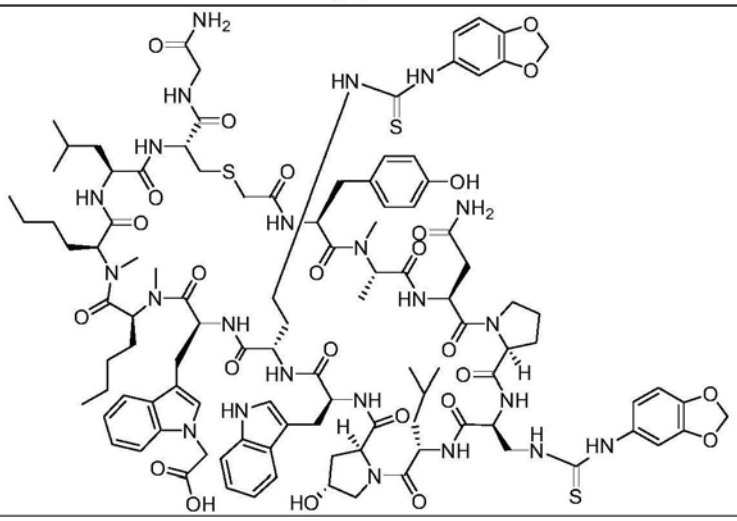
| | |
|---|---|
| 保留时间 | 1.74 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

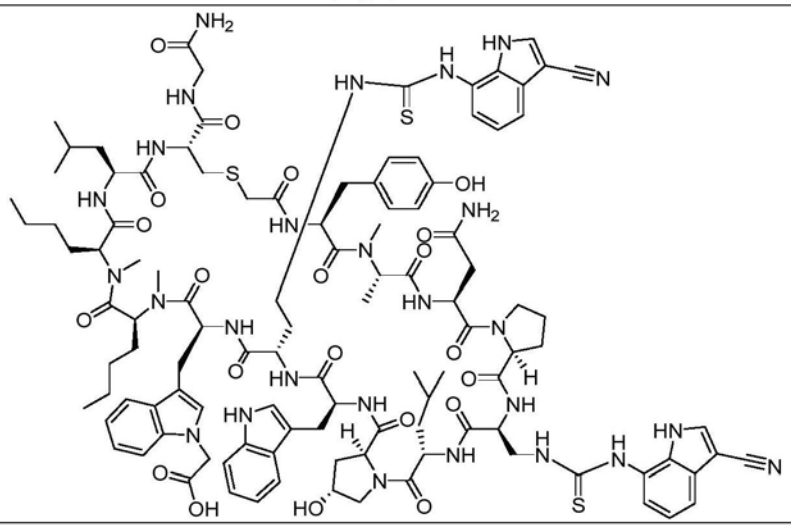
| 化合物3048 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异硫氰酰基-2-甲基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1038 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1038 |
| 保留时间 | 1.75 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3049 |
|---|

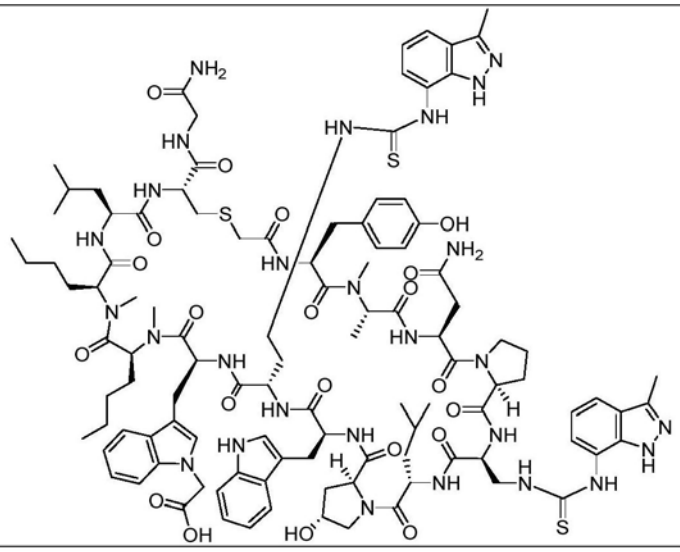


| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异硫氰酰基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1031 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1031 |
| 保留时间 | 1.74 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

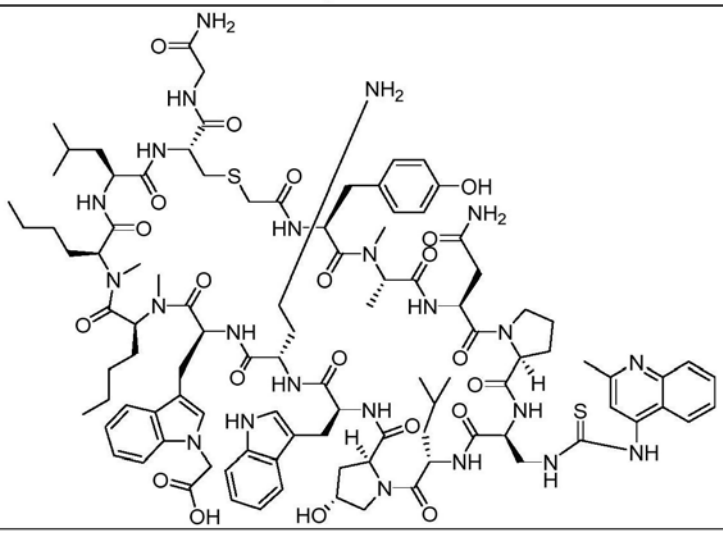
| 化合物3050 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基苯并[d][1,3]二氧杂环戊烯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1123 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1123 |
| 保留时间 | 1.77 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 µm颗粒 |

| 化合物3051 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-1H-吲哚-3-甲腈 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1143 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1143 |
| 保留时间 | 1.83 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3052 |
|---|

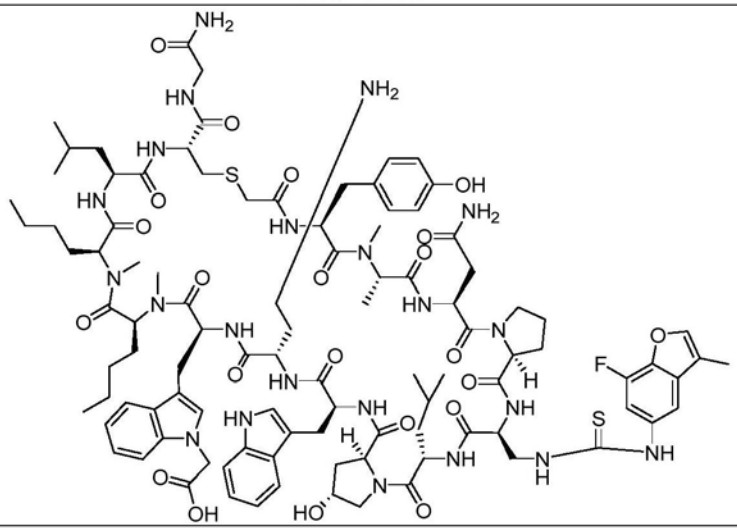


| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-3-甲基-1H-吲唑 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1133 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1133 |
| 保留时间 | 1.80 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

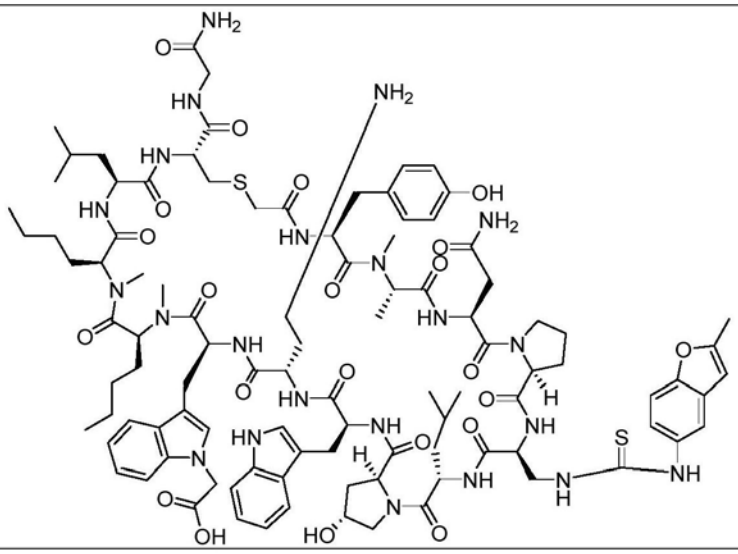
| 化合物3053 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 4-异硫氰酰基-2-甲基喹啉 |
| **MS** | |

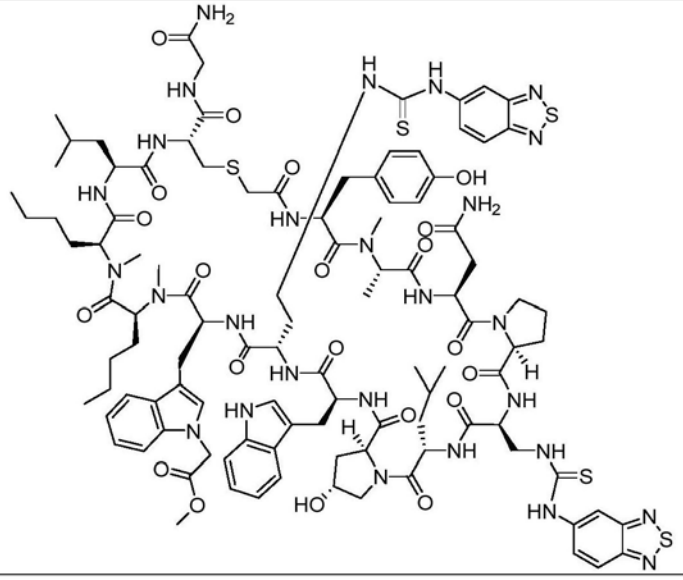
| | |
| --- | --- |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1044 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1044 |
| 保留时间 | 1.81 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3054 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-氟-5-异硫氰酰基-3-甲基苯并呋喃 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1047 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1047 |
| 保留时间 | 1.93 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

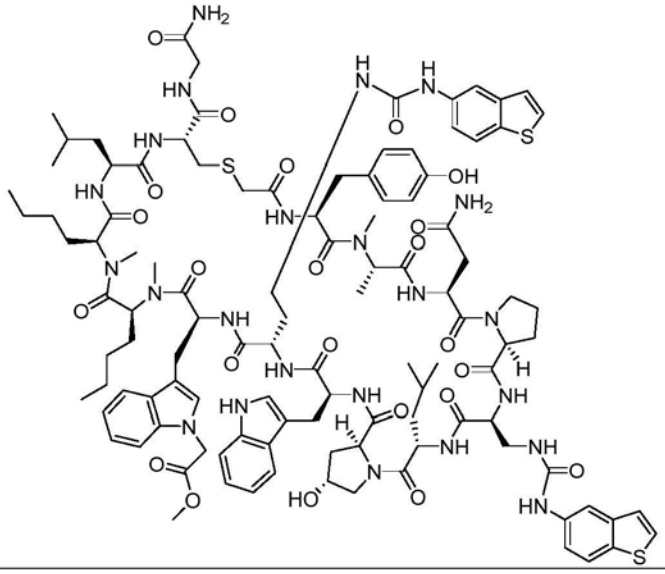
| 化合物3055 |
|---|



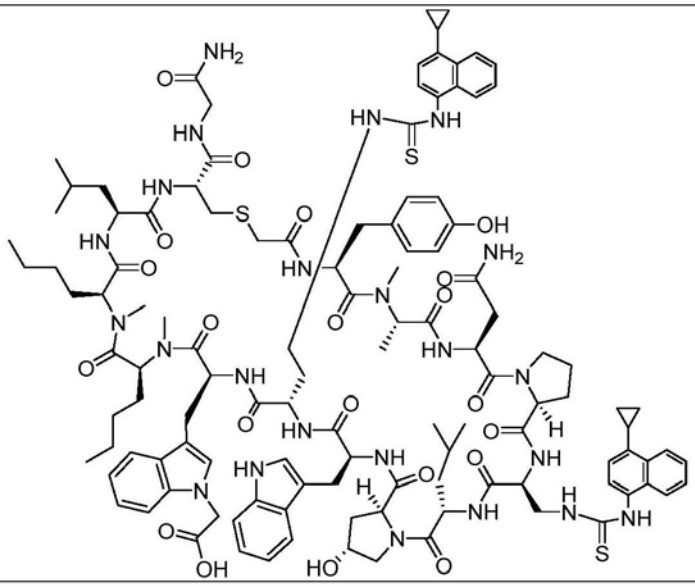
| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基-2-甲基苯并呋喃 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1038 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1038 |
| 保留时间 | 1.90 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3056 |
| --- |
|  |
| **使用的试剂** |
| 起始材料 BMT-002 |

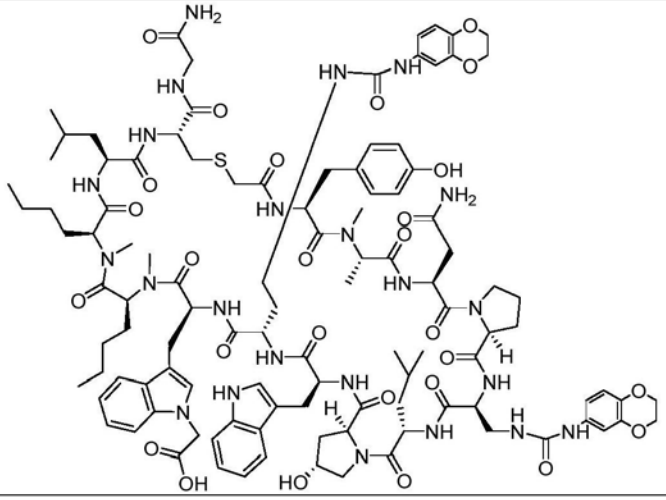
| | |
| --- | --- |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基苯并[c][1,2,5]噻二唑 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1144 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1144 |
| 保留时间 | 2.24 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3057 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-002 |
| 亲电子试剂 | 5-异氰酰基苯并[b]噻吩 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1126 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1126 |
| 保留时间 | 2.27 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

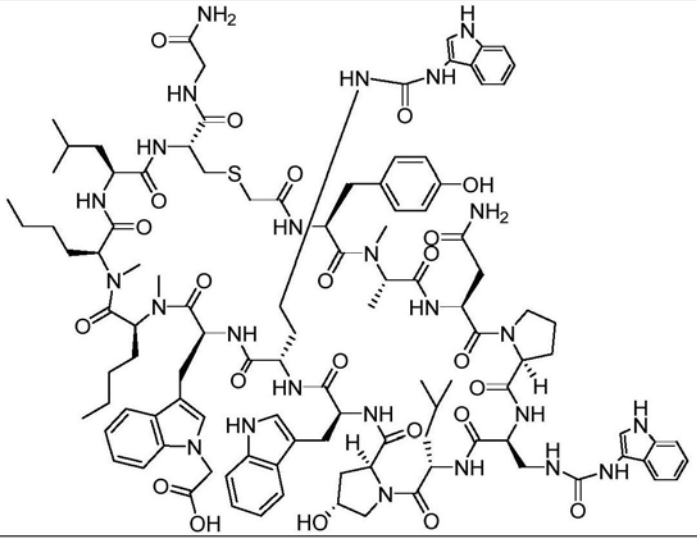
| 化合物3058 |
|---|



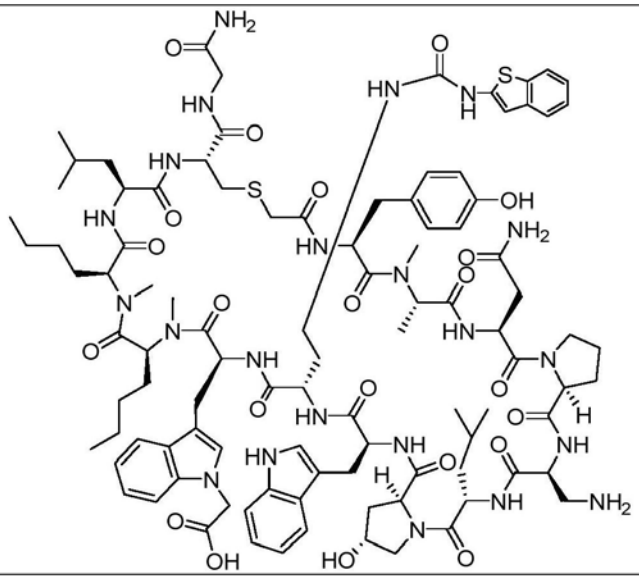
| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 1-环丙基-4-异硫氰酰基萘 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1169 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1169 |
| 保留时间 | 2.14 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3059 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异氰酰基-2,3-二氢苯并[b][1,4]二噁英 |
| **MS** | |

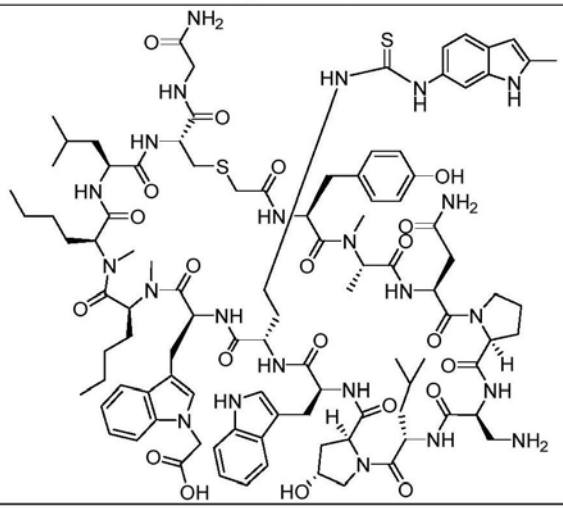
| | |
|---|---|
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1121 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1121 |
| 保留时间 | 1.71 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3060 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 3-异氰酰基-1H-吲哚 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1102 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1102 |
| 保留时间 | 1.70 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 : 含0.1%三氟乙酸的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70°C |
| 柱 | Waters CSH C18, 2.1 mm x 50 mm, 1.7 μm颗粒 |

| 化合物3061 |
|---|

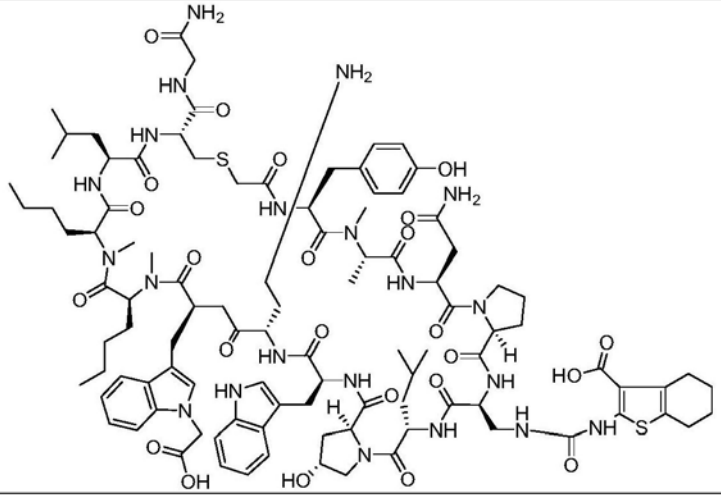


| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异氰酰基苯并[b]噻吩 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1031 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1031 |
| 保留时间 | 1.80 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

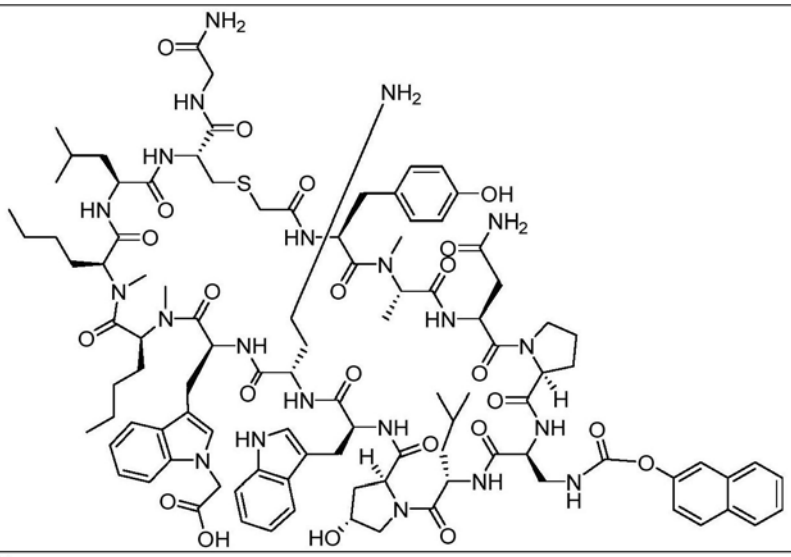
| 化合物3062 |
| --- |
|  |

| 使用的试剂 | |
| --- | --- |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异硫氰酰基-2-甲基-1H-吲哚 |

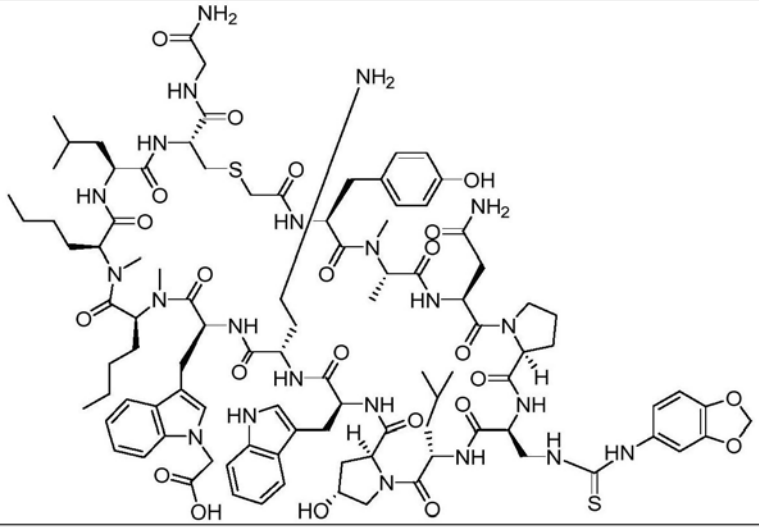
| MS | |
| --- | --- |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1038 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1038 |
| 保留时间 | 1.75 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3063 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 2-异硫氰酰基-4,5,6,7-四氢苯并[b]噻吩-3-甲酸乙酯 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1055 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1055 |
| 保留时间 | 1.68 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3064 |
|---|

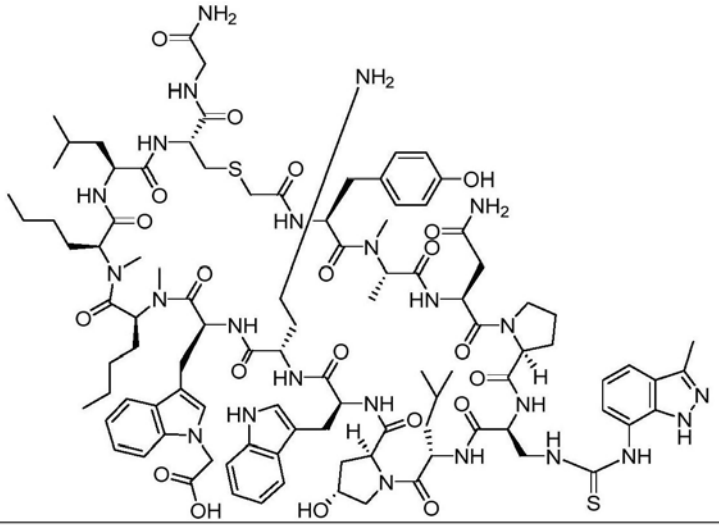


| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 萘-2-基氯甲酸酯 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1029 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1029 |
| 保留时间 | 1.81 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

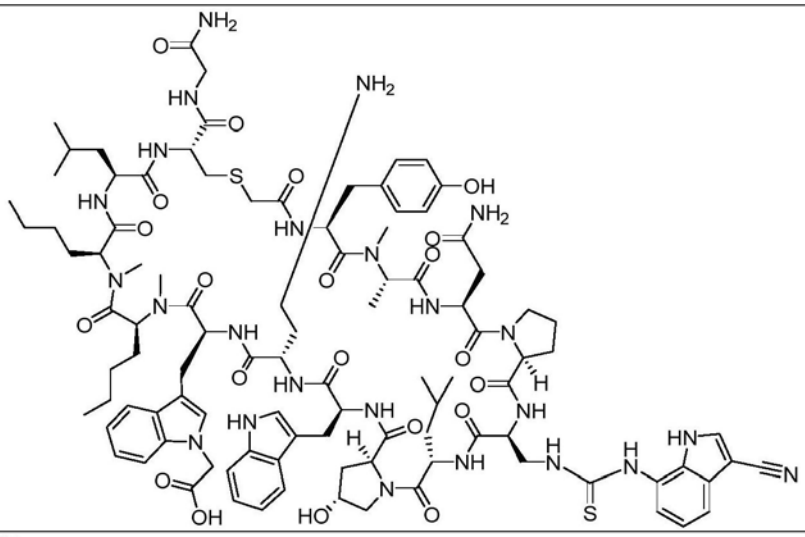
| 化合物3065 |
|---|
|  |

| 使用的试剂 | |
|---|---|
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基苯并[d][1,3]二氧杂环戊烯 |

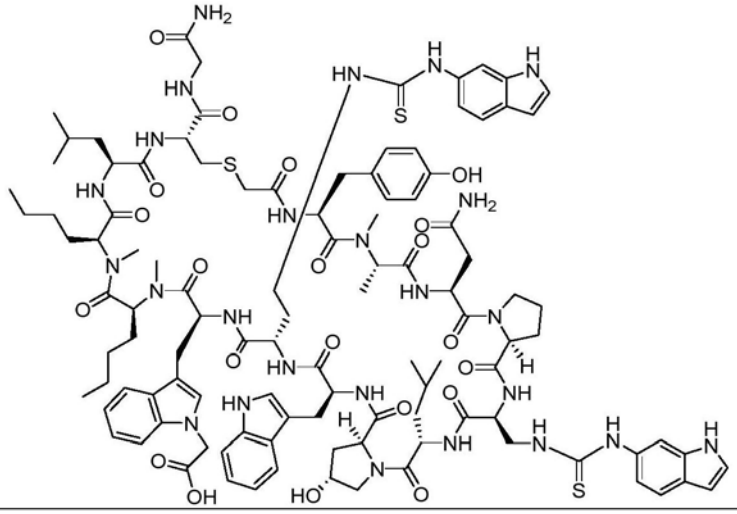
| MS | |
|---|---|
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1033 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1033 |
| 保留时间 | 1.63 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3066 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-3-甲基-1H-吲唑 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1038 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1038 |
| 保留时间 | 1.67 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

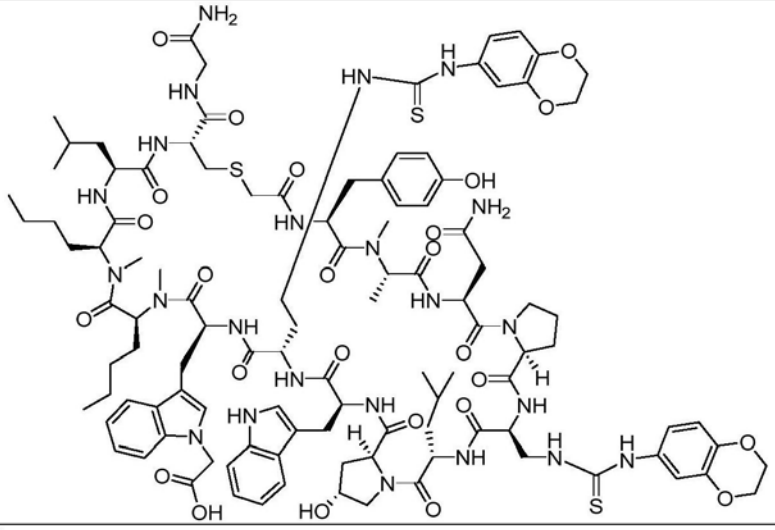
| 化合物3067 |
|---|



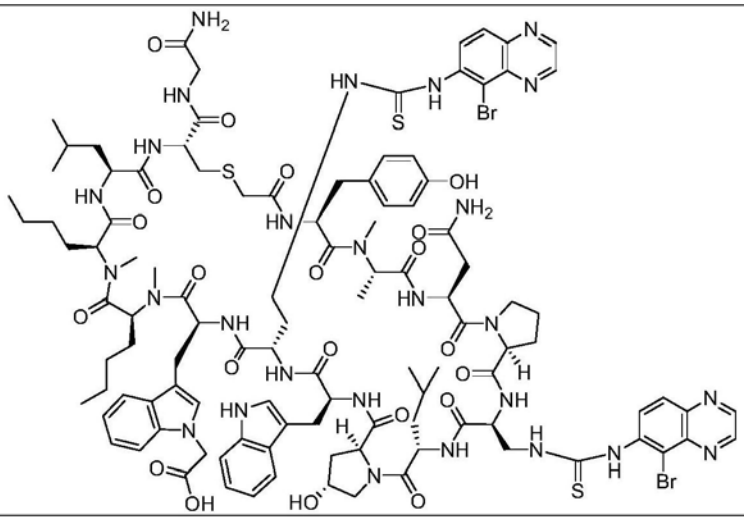
| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 7-异硫氰酰基-1H-吲哚-3-甲腈 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1043 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1043 |
| 保留时间 | 1.64 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3068 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异硫氰酰基-1H-吲哚 |
| **MS** | |

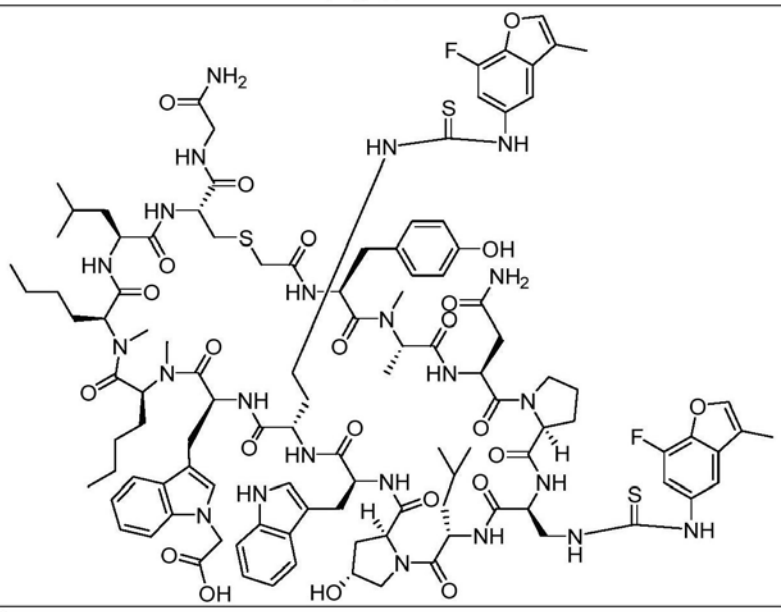
| | |
|---|---|
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1118 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1118 |
| 保留时间 | 1.72 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50°C |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3069 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异硫氰酰基-2,3-二氢苯并[b][1,4]二噁英 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1137 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1137 |
| 保留时间 | 1.69 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

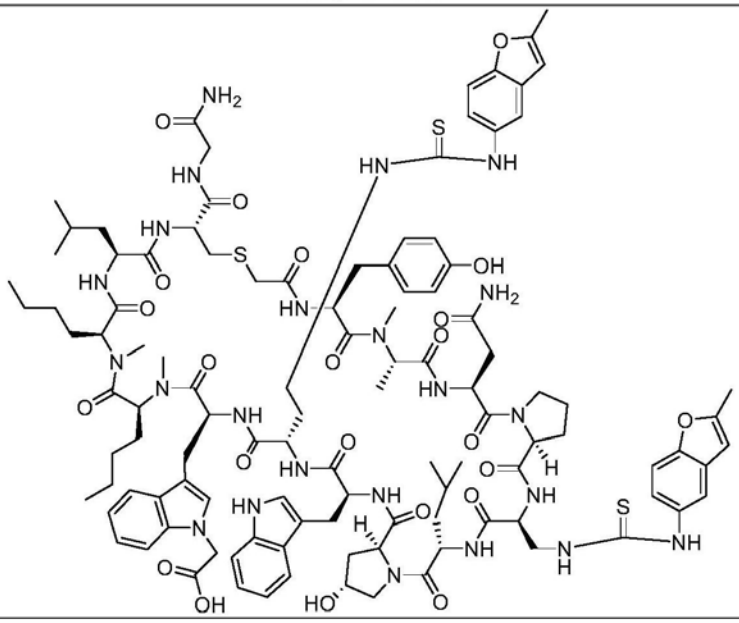
| 化合物3070 |
|---|



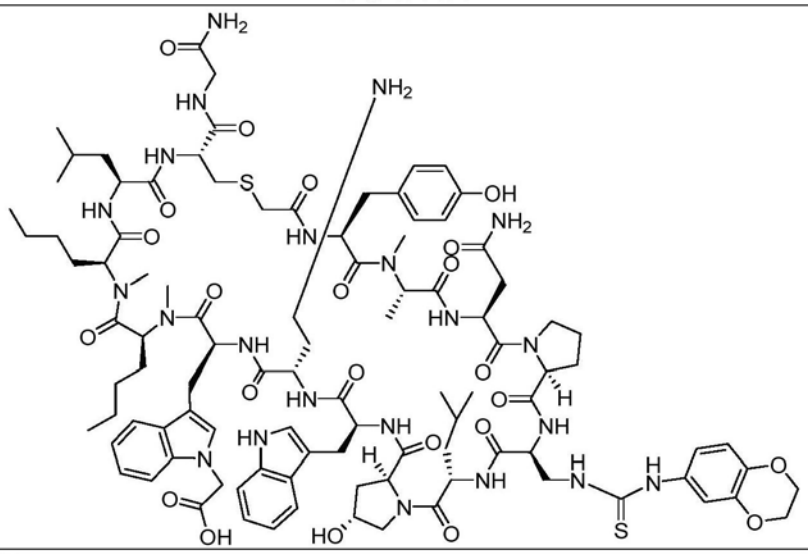
| | |
|---|---|
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-溴-6-异硫氰酰基喹喔啉 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1209 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1209 |
| 保留时间 | 1.67 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3071 |
| --- |
|  |
| **使用的试剂** |
| 起始材料 BMT-001 |

| | |
| --- | --- |
| 亲电子试剂 | 7-氟-5-异硫氰酰基-3-甲基苯并呋喃 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1152 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1152 |
| 保留时间 | 1.88 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3072 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 5-异硫氰酰基-2-甲基苯并呋喃 |
| **MS** | |
| MS $(M/2+H)^+$计算值 | 1133 |
| MS $(M/2+H)^+$实测值 | 1133 |
| 保留时间 | 1.80 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 0.75 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 70ºC |

| | |
|---|---|
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

| 化合物3073 | |
|---|---|
|  | |
| **使用的试剂** | |
| 起始材料 | BMT-001 |
| 亲电子试剂 | 6-异硫氰酰基-2,3-二氢苯并[b][1,4]二噁英 |
| **MS** | |
| MS (M/2 + H)$^+$计算值 | 1040 |
| MS (M/2 + H)$^+$实测值 | 1040 |
| 保留时间 | 1.67 min |
| **LC条件** | |
| 溶剂A | 5 : 95<br>乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 溶剂B | 95 : 5 乙腈 ： 含10 mM乙酸铵的水 |
| 开始% B | 0 |
| 最终% B | 100 |
| 梯度时间 | 3 min |
| 流速 | 1 mL/min |
| 波长 | 220 |
| 温度 | 50ºC |
| 柱 | Waters XBridge C18，2.1 mm x 50 mm，1.7 μm颗粒 |

生物活性

[0100] 使用PD-1/PD-L1均相时间分辨荧光(HTRF)结合测定研究式(I)的化合物与PD-L1结合的能力。

均相时间分辨荧光(HTRF)结合测定

[0101] 可以使用PD-1和PD-L1的胞外结构域的可溶的纯化制剂来评估这两种蛋白质的相互作用。PD-1和PD-L1蛋白质的胞外结构域表达为具有检测标签的融合蛋白，对于PD-1，标签是免疫球蛋白的Fc部分(PD-1-Ig)；并且对于PD-L1，它是6组氨酸基序(PD-L1-His)。所有结合研究在HTRF测定缓冲液中进行，所述缓冲液由补充有0.1％(含)牛血清白蛋白和0.05％(v/v)Tween-20的dPBS组成。对于h/PD-L1-His结合测定，将抑制剂与PD-L1-His(最终10nM)在4μl测定缓冲液中预孵育15m，然后添加在1μl测定缓冲液中的PD-1-Ig(最终20nM)并且进一步孵育15m。使用铕窝穴体(crypate)标记的抗Ig(最终1nM)和别藻蓝蛋白(APC)标记的抗His(最终20nM)实现HTRF检测。将抗体在HTRF检测缓冲液中稀释，并且在结

合反应之上分配5μl。允许使反应混合物平衡30分钟，并且使用EnVision荧光计获得所得信号(665nm/620nm比)。在人蛋白质PD-1-Ig/PD-L2-His(分别为20nM和5nM)与CD80-His/PD-L1-Ig(分别为100nM和10nM)之间建立另外的结合测定。

[0102] 重组蛋白：将具有免疫球蛋白G(Ig)表位标签的C末端人Fc结构域的人PD-1(25-167)[hPD-1(25-167)-3S-IG]和具有C末端His表位标签的人PD-L1(18-239)[hPD-L1(18-239)-TVMV-His]在HEK293T细胞中表达，并且通过ProteinA亲和色谱法和尺寸排阻色谱法依次纯化。通过商业来源获得人PD-L2-His和CD80-His。

[0103] 表1列出了在PD-1/PD-L1均相时间分辨荧光(HTRF)结合测定中测量的本公开文本的代表性实施例的$IC_{50}$值。

表1

| 实施例编号 | HTRF $IC_{50}$ (μM) |
|---|---|
| **1001** | 0.0019 |
| **1002** | 0.0035 |
| **1003** | > 10.00 |
| **1004** | 0.023 |
| **1005** | > 10.00 |
| **1006** | 0.0002 |
| **1007** | 0.032 |
| **1008** | 0.0076 |
| **1009** | 0.0065 |
| **1010** | 0.0071 |
| **1011** | 0.017 |
| **1012** | 0.0048 |
| **1013** | 0.0052 |
| **1014** | 0.0007 |
| **1015** | 0.274 |
| **1016** | 0.0030 |
| **1017** | 0.0075 |
| **1018** | 0.00998 |
| **1019** | 0.0034 |
| **1020** | 0.024 |
| **1021** | 0.0042 |
| **1022** | 0.0035 |
| **1023** | 0.032 |
| **1024** | 0.0032 |
| **1025** | 0.0008 |
| **1026** | 0.0043 |
| **1027** | 0.0037 |
| **1028** | 0.0044 |
| **1029** | 0.0031 |
| **1030** | 0.0026 |
| **1031** | 0.0028 |
| **1032** | > 10.00 |

| 实施例编号 | HTRF $IC_{50}$ (μM) |
|---|---|
| **1115** | 0.010 |
| **1116** | 0.018 |
| **1117** | 0.0047 |
| **1118** | 0.0043 |
| **1119** | 0.0034 |
| **1120** | 0.0085 |
| **1121** | 0.014 |
| **1122** | 0.014 |
| **1123** | 0.0044 |
| **1124** | 0.087 |
| **1125** | 0.0067 |
| **1126** | 0.0010 |
| **1127** | 0.0030 |
| **1128** | 0.0006 |
| **1129** | 0.0094 |
| **1130** | 0.0020 |
| **1131** | 0.0073 |
| **1132** | 0.0037 |
| **1133** | 0.0084 |
| **1134** | 0.0024 |
| **1135** | 0.0049 |
| **1136** | 0.014 |
| **1137** | 0.020 |
| **1138** | 0.0097 |
| **1139** | 0.013 |
| **1140** | 0.0060 |
| **2001** | 0.184 |
| **2002** | >10 |
| **2003** | 0.0226 |
| **2004** | >10 |
| **2005** | >10 |
| **2006** | 1.59 |

| 实施例编号 | HTRF $IC_{50}$ (μM) |
|---|---|
| **1033** | 0.0026 |
| **1034** | 0.0035 |
| **1035** | 0.0021 |
| **1036** | 0.0026 |
| **1037** | 0.0028 |
| **1038** | 0.0024 |
| **1039** | 0.0006 |
| **1040** | 0.0039 |
| **1041** | 0.0023 |
| **1042** | 0.0040 |
| **1043** | 0.0006 |
| **1044** | 0.0033 |
| **1045** | 0.0033 |
| **1046** | 0.011 |
| **1047** | > 10.00 |
| **1048** | > 10.00 |
| **1049** | n/a |
| **1050** | 0.039 |
| **1051** | n/a |
| **1052** | > 10.00 |
| **1053** | 0.0032 |
| **1054** | 0.0035 |
| **1055** | 0.0009 |
| **1056** | 0.0031 |
| **1057** | 0.0032 |
| **1058** | 0.0040 |
| **1059** | 0.0035 |
| **1060** | 0.0011 |
| **1061** | 0.0040 |
| **1062** | 0.0034 |
| **1063** | 0.0037 |
| **1064** | 0.0030 |
| **1065** | 0.0028 |
| **1066** | 0.0029 |
| **1067** | 0.0027 |
| **1068** | 0.0043 |
| **1069** | 0.0004 |
| **1070** | 0.0055 |
| **1071** | 0.0023 |
| **1072** | 0.0049 |
| **1073** | 0.0079 |
| **1074** | 0.0063 |
| **1075** | 0.091 |

| 实施例编号 | HTRF $IC_{50}$ (μM) |
|---|---|
| **2007** | 0.0133 |
| **2008** | 0.0467 |
| **2009** | 0.0036 |
| **2010** | 0.0037 |
| **2011** | 0.0047 |
| **2012** | 0.0152 |
| **2013** | 0.0081 |
| **2014** | 0.0038 |
| **2015** | 0.0032 |
| **3001** | 0.0073 |
| **3002** | 0.0043 |
| **3003** | 0.0023 |
| **3004** | 0.0054 |
| **3005** | 0.0032 |
| **3006** | 0.0028 |
| **3007** | 0.0026 |
| **3008** | 0.0064 |
| **3009** | 0.0090 |
| **3010** | 0.0078 |
| **3011** | 0.0082 |
| **3012** | 0.0053 |
| **3013** | n/a |
| **3014** | 0.0049 |
| **3015** | 0.0007 |
| **3016** | 0.0006 |
| **3017** | 0.0036 |
| **3018** | 0.0038 |
| **3019** | 0.0033 |
| **3020** | 0.0025 |
| **3021** | n/a |
| **3022** | 0.011 |
| **3023** | 0.0016 |
| **3024** | 0.0032 |
| **3025** | 0.0029 |
| **3026** | 0.0033 |
| **3027** | 0.0039 |
| **3028** | 0.0006 |
| **3029** | 0.0001 |
| **3030** | 0.0030 |
| **3031** | 0.0031 |
| **3032** | 0.0092 |
| **3033** | 0.0015 |
| **3034** | 0.0032 |

| 实施例编号 | HTRF $IC_{50}$ (μM) |
|---|---|
| **1076** | 0.0081 |
| **1077** | 0.0057 |
| **1078** | 0.0041 |
| **1079** | 0.0025 |
| **1080** | 0.0034 |
| **1081** | 0.0027 |
| **1082** | 0.0015 |
| **1083** | 0.0006 |
| **1084** | 0.0026 |
| **1085** | 0.0038 |
| **1086** | 0.0042 |
| **1087** | 0.0026 |
| **1088** | 0.0029 |
| **1089** | 0.012 |
| **1090** | 0.242 |
| **1091** | 0.0043 |
| **1092** | 0.0034 |
| **1093** | 0.0033 |
| **1094** | 0.0024 |
| **1095** | 0.0057 |
| **1096** | 0.0069 |
| **1097** | 0.0057 |
| **1098** | 0.0031 |
| **1099** | 0.0026 |
| **1100** | 0.018 |
| **1101** | 0.0086 |
| **1102** | n/a |
| **1103** | 0.0065 |
| **1104** | 0.012 |
| **1105** | 0.026 |
| **1106** | 0.00998 |
| **1107** | 0.0005 |
| **1108** | 0.0024 |
| **1109** | 0.0015 |
| **1110** | 0.0020 |
| **1111** | 0.0090 |
| **1112** | 0.0012 |
| **1113** | 0.0093 |
| **1114** | 0.0025 |

| 实施例编号 | HTRF $IC_{50}$ (μM) |
|---|---|
| **3036** | 0.0027 |
| **3037** | 0.0050 |
| **3038** | 0.0053 |
| **3039** | 0.0038 |
| **3040** | 0.0008 |
| **3041** | 0.0003 |
| **3042** | 0.0025 |
| **3043** | 0.0032 |
| **3044** | 0.0030 |
| **3045** | 0.0013 |
| **3046** | 0.0033 |
| **3047** | 0.0058 |
| **3048** | 0.0030 |
| **3049** | 0.0041 |
| **3050** | 0.0027 |
| **3051** | 0.0045 |
| **3052** | 0.0039 |
| **3053** | 0.0034 |
| **3054** | 0.0013 |
| **3055** | 0.0028 |
| **3056** | 0.0056 |
| **3057** | 0.034 |
| **3058** | 0.013 |
| **3059** | 0.0030 |
| **3060** | 0.0027 |
| **3061** | 0.0056 |
| **3062** | n/a |
| **3063** | 0.0019 |
| **3064** | n/a |
| **3065** | 0.00098 |
| **3066** | 0.0046 |
| **3067** | 0.0052 |
| **3068** | 0.0020 |
| **3069** | 0.0031 |
| **3070** | 0.0059 |
| **3071** | 0.0034 |
| **3072** | 0.0015 |
| **3073** | 0.0050 |

[0104] 式(I)的化合物具有作为PD-1/PD-L1相互作用的抑制剂的活性,并且因此可以用于治疗与PD-1/PD-L1相互作用相关的疾病或缺陷。通过抑制PD-1/PD-L1相互作用,本公开文本的化合物可以用于治疗感染性疾病(诸如HIV、脓毒性休克、甲型肝炎、乙型肝炎、丙型肝炎或丁型肝炎)和癌症。

[0105] 应领会,具体实施方式部分而不是发明内容和摘要部分旨在用于解释权利要求。

发明内容和摘要部分可以阐述如诸位发明人所设想的本公开文本的一个或多个但不是所有的示例性实施方案，并且因此，不旨在以任何方式限制本公开文本和所附权利要求。

[0106] 上文已经借助于说明特定功能的实现及其关系的功能构造模块描述了本公开文本。为了描述方便，本文已经任意定义了这些功能构造模块的边界。只要适当执行特定功能及其关系，就可以定义替代的边界。

[0107] 具体实施方案的前面描述将充分揭示本公开文本的总体性质，使得其他人可以通过应用本领域技术内的知识，在无需过度实验并且不偏离本公开文本总体概念的情况下容易地修改和/或改编此类具体实施方案的各种应用。因此，基于本文给出的传授内容和指导，此类调整和修改旨在包含在所公开的实施方案的等效方案的含义和范围内。应理解，本文中的措辞或术语是出于描述而非限制的目的，因此本说明书的术语或措辞将由本领域技术人员根据传授内容和指导来解释。

[0108] 本公开文本的广度和范围应当不限于以上描述的示例性实施方案中的任一个，而应当仅根据以下权利要求和它们的等效物来限定。