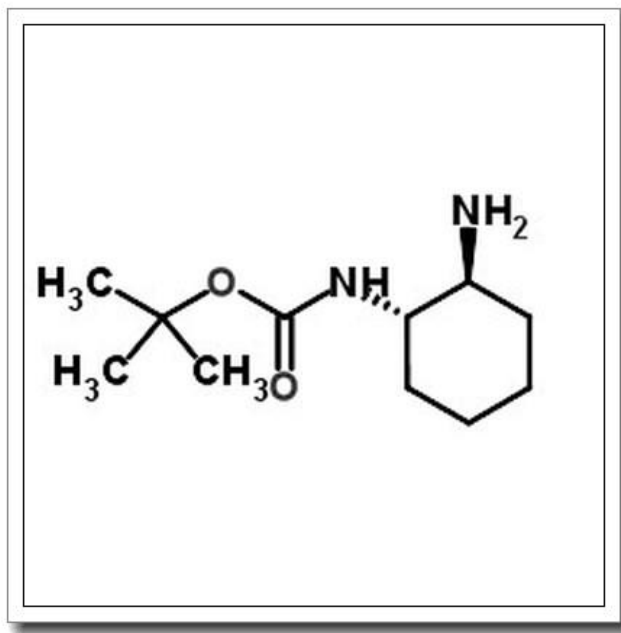


# (1S,2S)-BOC-1,2-环己二胺

*tert-butyl N-[(1S, 2S)-2-aminocyclohexyl]carbamate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl N-[(1S, 2S)-2-aminocyclohexyl]carbamate</i>
中文名称	(1S, 2S)-BOC-1, 2-环己二胺
CAS 号	180683-64-1
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	214.305
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

tert-butyl N-[(1S,2S)-2-aminocyclohexyl]carbamate (中文名称: (1S,2S)-BOC-1,2-环己二胺) 是一种手性氨基甲酸酯类化合物, CAS 号为 180683-64-1, 分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>22</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 214.305。该化合物以 BOC (叔丁氧羰基) 保护基修饰的 (1S,2S)-1,2-环己二胺为核心结构, 纯度高于 96%, 常温下为白色至类白色结晶或粉末。其化学特性包括良好的有机溶剂溶解性 (如甲醇、二氯甲烷) 以及对酸敏感 (BOC 基团可在酸性条件下脱保护), 适合作为手性合成砌块或中间体使用。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为手性胺类衍生物, 该化合物在不对称合成中具有重要价值。BOC 保护基可选择性屏蔽氨基活性, 避免副反应发生, 同时保留 (1S,2S)-构型的立体化学特性。其在肽类修饰、金属配体合成及生物活性分子构建中表现出高立体选择性和反应可控性, 是制备手性催化剂、药物中间体 (如抗病毒或抗癌药物) 的关键原料。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。具体用途包括: 1) 作为手性配体参与过渡金属催化反应 (如不对称氢化); 2) 合成蛋白酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的中间体; 3) 用于光学活性高分子材料的单体修饰。典型案例如抗丙肝药物 simeprevir 的合成路径中作为构型控制单元。

### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8°C 干燥避光环境中, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需避免反复冻融及湿度波动。使用前需恢复至室温并检测纯度 (推荐 HPLC 或 NMR 验证)。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触强酸或氧化剂以防 BOC 基团降解。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过质谱 (MS)、核磁共振 (NMR) 及高效液相色谱 (HPLC) 三重验证, 确保立体构型与纯度符合标准。安全数据表明, 该物质对眼睛和皮肤有轻微刺激性

(GHS 分类: Eye Irrit. 2), 操作时需佩戴防护眼镜及手套。如意外吸入或接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵守当地有机化学品处理法规。