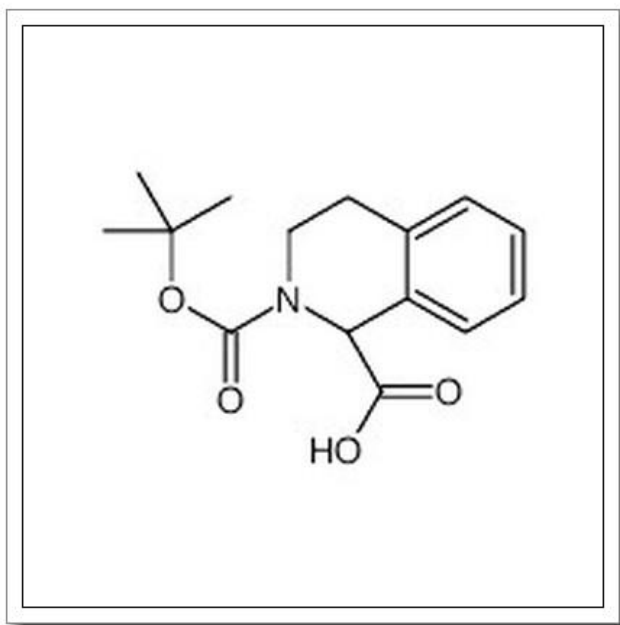


(R)-2-(叔丁氧羰基)-1,2,3,4-四氢异喹啉羧酸

(1R)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-3,4-dihydro-1H-isoquinoline-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-3,4-dihydro-1H-isoquinoline-1-carboxylic acid
中文名称	(R)-2-(叔丁氧羰基)-1,2,3,4-四氢异喹啉羧酸
CAS 号	151004-96-5
分子式	C ₁₅ H ₁₉ N ₀₄
分子量	277.316
纯度	>96%

产品说明

(R)-2-(叔丁氧羰基)-1,2,3,4-四氢异喹啉羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(1R)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-3,4-dihydro-1H-isoquinoline-1-carboxylic acid, 是一种具有光学活性的四氢异喹啉衍生物。其分子式为C₁₅H₁₉N₀₄, 分子量 277.316, CAS 号为 151004-96-5。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度≥96%, 结构中含有叔丁氧羰基(Boc)保护基团和羧酸官能团, 具有显著的手性特征(R构型), 在有机合成中可作为关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性构建单元, 该化合物在不对称合成中表现出高立体选择性, 尤其适用于肽类化合物和生物碱的结构修饰。其Boc保护基在酸性条件下可选择性脱除, 而羧基团可进一步衍生化为酯、酰胺等官能团, 为药物分子设计提供灵活的结构改造平台。在生物活性分子研发中, 该结构片段已被证实可增强化合物的膜穿透性和代谢稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和精细化工领域:

- (1) 作为抗肿瘤药物(如拓扑异构酶抑制剂)和中枢神经系统药物(如阿片受体调节剂)的合成前体;
- (2) 用于构建天然产物核心骨架, 如异喹啉类生物碱的全合成;
- (3) 在固相多肽合成(SPPS)中作为手性氨基酸类似物, 用于引入构型约束;
- (4) 作为有机催化剂或配体的合成原料。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C、干燥惰性气体(如氩气)保护下长期储存, 短期使用可存放于2-8°C密封避光环境。开封后需充氮气密封, 防止吸湿和氧化。溶解性测试表明易

溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于甲醇，水溶性差。实验操作建议在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (C18 柱, 254nm 检测) 确保纯度 $\geq 96\%$, 旋光度检测验证光学纯度。MS 和 NMR 谱图与标准品一致。该化合物属于刺激性化学品, CAS 号 151004-96-5 已列入 REACH 法规注册清单。操作时需佩戴防护手套及护目镜, 若接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理规范。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。)