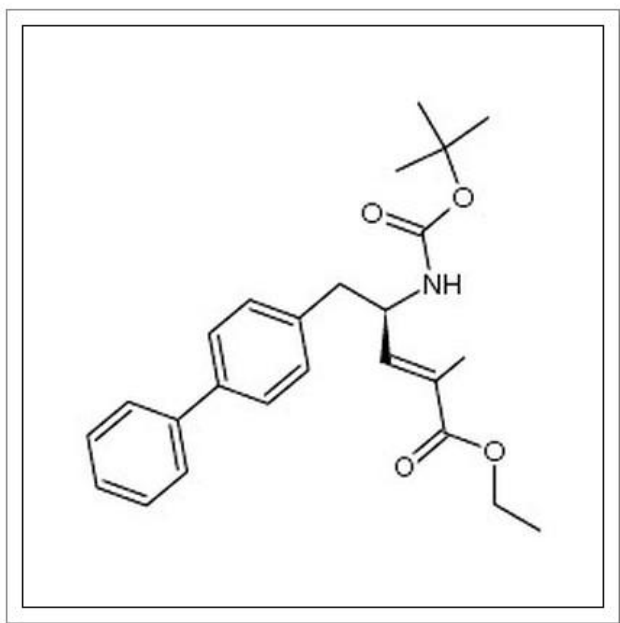


(R,E)-5-((1,1-联苯)-4-基)-4-((叔丁氧基羰基)氨基)-2-甲基戊-2-烯酸乙酯

ethyl 5-(4-[1,1'-biphenyl]yl)-4-[[(1,1-dimethylethoxy) carbonyl] amino]-2-methyl-2-pentenoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 5-(4-[1,1'-biphenyl]yl)-4-[[(1,1-dimethylethoxy) carbonyl] amino]-2-methyl-2-pentenoate
中文名称	(R,E)-5-((1,1-联苯)-4-基)-4-((叔丁氧基羰基)氨基)-2-甲基戊-2-烯酸乙酯
CAS 号	149709-59-1
分子式	C ₂₅ H ₃₁ N ₀₄
分子量	409.518
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(R,E)-5-((1,1-联苯)-4-基)-4-((叔丁氧基羰基)氨基)-2-甲基戊-2-烯酸乙酯, 化学名称 ethyl 5-(4-[1,1'-biphenyl]yl)-4-[[1,1-dimethylethoxy)carbonyl]amino]-2-methyl-2-pentenoate, CAS 号 149709-59-1, 分子式 C₂₅H₃₁N₁O₄, 分子量 409.518。该化合物是一种高纯度 (>96%) 的有机中间体, 具有明确的立体构型 (R,E-构型), 其结构包含联苯基团、叔丁氧羰基 (Boc) 保护氨基以及 α, β -不饱和酯键, 赋予其独特的化学反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

本产品 in 生物化学领域主要作为多肽合成和药物研发的关键中间体。Boc 保护基团可选择性脱除, 便于后续氨基官能团的修饰; 联苯结构可增强分子刚性, 常用于构建靶向蛋白的结合位点。其 α, β -不饱和酯键可作为迈克尔受体参与共价键形成, 或通过还原反应转化为饱和链, 在药物分子设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于以下领域:

- 1) 医药研发: 作为激酶抑制剂、抗肿瘤或抗炎药物的合成前体;
- 2) 多肽修饰: 用于引入疏水性联苯基团, 改善肽类药物的膜穿透性;
- 3) 材料科学: 作为液晶材料或高分子单体的功能化砌块。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用时避免接触强氧化剂或酸碱环境, 溶解推荐使用无水 DMF 或 THF。因含不饱和酯键, 长期暴露于空气中可能导致聚合, 建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 验证结构。操作时需佩戴防护手套及护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理, 遵守当地环保法规。

注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可提供 COA（分析证书）及 MSDS（安全数据表）。