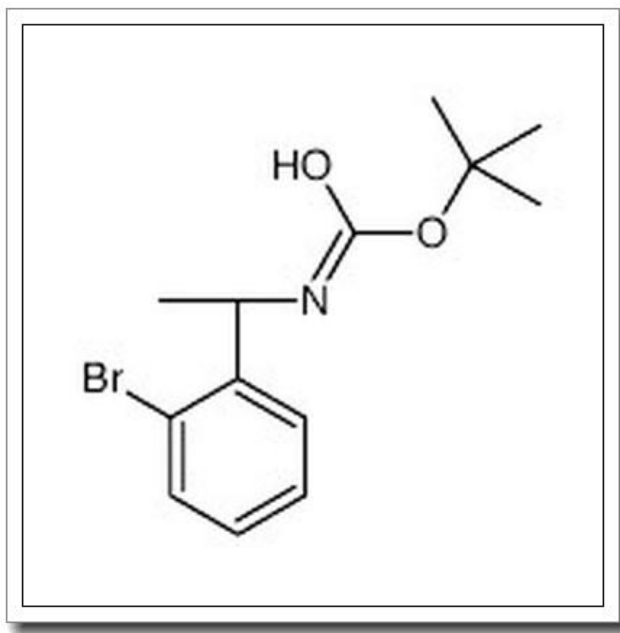


(S)-(2-溴苯基)乙基氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl N-[(1S)-1-(2-bromophenyl)ethyl]carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl N-[(1S)-1-(2-bromophenyl)ethyl]carbamate</i>
中文名称	(S)-(2-溴苯基)乙基氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	1187932-11-1
分子式	C ₁₃ H ₁₈ BrN ₂ O ₂
分子量	300.192
纯度	>96%

产品说明

产品名称: (S)-(2-溴苯基)乙基氨基甲酸叔丁酯

化学名称: tert-butyl N-[(1S)-1-(2-bromophenyl)ethyl]carbamate

CAS 号: 1187932-11-1

分子式: C₁₃H₁₈BrN₂O₂

分子量: 300.192

纯度: >96%

1. 产品概述与化学特性

(S)-(2-溴苯基)乙基氨基甲酸叔丁酯是一种手性有机化合物,属于氨基甲酸酯类衍生物。其分子结构中包含一个叔丁氧羰基(Boc)保护基和一个2-溴苯基乙基骨架,具有显著的空间位阻效应和立体选择性。该化合物为白色至类白色结晶或粉末,易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯和四氢呋喃,但在水中溶解度较低。其化学稳定性良好,但在强酸或强碱条件下可能发生分解。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成和药物化学中具有重要价值,尤其作为手性中间体广泛应用于不对称合成。Boc保护基的存在使其在肽类和多步合成反应中能够选择性脱保护,同时2-溴苯基结构为后续的偶联反应(如Suzuki偶联)提供了活性位点。其立体构型(S型)在生物活性分子设计中可显著影响药理活性和靶标结合特异性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为手性砌块用于合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物。
- 材料科学: 参与功能化高分子材料的单体合成。
- 学术研究: 用于不对称催化反应和机理研究。

典型应用包括Boc保护基的引入与脱除、过渡金属催化交叉偶联反应以及手性配体的制备。

4. 储存条件与使用建议

储存条件：应密封保存于 2-8℃干燥环境中，避免光照和湿气。长期储存建议充入惰性气体（如氮气）。

使用建议：操作时需在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。溶解建议使用无水级有机溶剂，反应体系需严格除氧除水以保证产率。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 测定纯度>96%，手性 HPLC 确认对映体过量（ee 值） \geq 99%。

批次检测包括水分、残留溶剂及重金属含量。

安全信息：本品对眼睛和皮肤有刺激性，可能引起过敏反应。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。安全数据表（SDS）可随货提供。