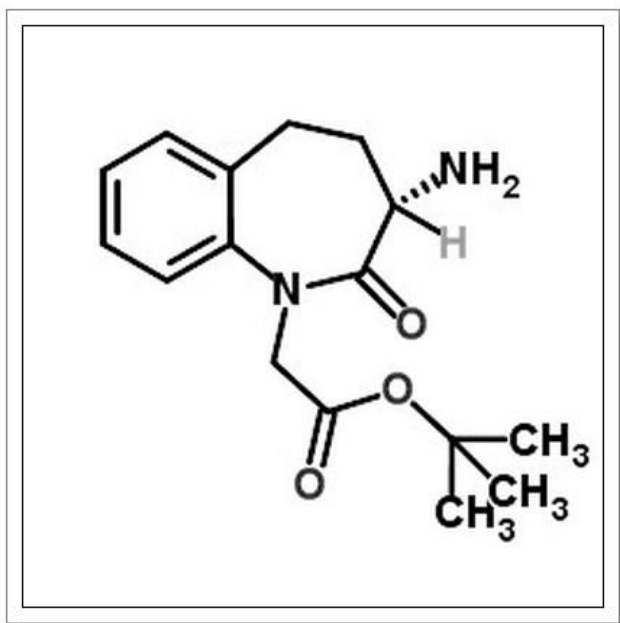


(S)-3-氨基-2,3,4,5-四氢-2-氧-1H-1-苯并氮杂卓-1-乙酸叔丁酯

(S)-tert-Butyl 2-(3-amino-2-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b]azepin-1-yl)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-tert-Butyl 2-(3-amino-2-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b]azepin-1-yl)acetate
中文名称	(S)-3-氨基-2,3,4,5-四氢-2-氧-1H-1-苯并氮杂卓-1-乙酸叔丁酯
CAS 号	109010-60-8
分子式	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O ₃
分子量	290.358
纯度	>96%

产品说明

(S)-3-氨基-2,3,4,5-四氢-2-氧-1H-1-苯并氮杂卓-1-乙酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(S)-tert-Butyl 2-(3-amino-2-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b]azepin-1-yl)acetate, CAS 号为 109010-60-8, 分子式为 C₁₆H₂₂N₂O₃, 分子量 290.358。该化合物为手性苯并氮杂卓衍生物, 结构中含氨基、酮基及叔丁酯基团, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状, 纯度 ≥96%。其立体构型 (S 型) 对生物活性具有关键影响, 需通过手性色谱确认光学纯度。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并氮杂卓类骨架的修饰物, 该化合物可通过氨基与酮基参与亲核反应或缩合反应, 是构建复杂杂环药物分子的重要中间体。其手性中心在受体结合或酶抑制过程中可能表现出立体选择性, 尤其在神经递质调节剂或蛋白酶抑制剂开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发: 用于合成靶向 G 蛋白偶联受体 (GPCRs) 或丝氨酸蛋白酶的候选药物, 如精神类疾病或心血管疾病治疗剂。
- 3.2 不对称合成: 作为手性助剂或构建块, 参与多步合成中的关键环化或官能团转化反应。
- 3.3 生化探针: 标记后可用于研究苯并氮杂卓类化合物与生物大分子的相互作用机制。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存: 密封保存于 -20℃ 干燥环境中, 避免光照与湿气, 长期储存建议充惰性气体保护。
- 4.2 溶解性: 易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 水溶性差, 建议预实验确定最佳

溶解条件。

4.3 操作：需在通风橱中使用，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准：通过 HPLC 测定纯度，手性 HPLC 确认对映体过量值 ($ee \geq 98\%$)，质谱与核磁共振 ($^1H/^{13}C$ NMR) 验证结构。

5.2 安全数据：根据 GHS 分类，可能引起眼睛刺激 (H319) 或皮肤刺激 (H315)，操作时需佩戴护目镜与丁腈手套。

5.3 废弃物处理：按危险有机废物处置，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验。