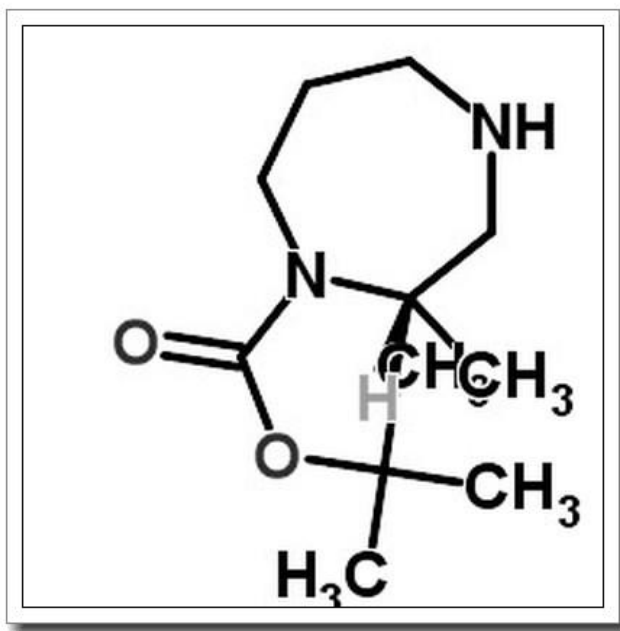


(S)-叔丁基-2-甲基-1,4-氮杂环庚烷-1-羧酸

(S)-tert-Butyl 2-methyl-1,4-diazepane-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-tert-Butyl 2-methyl-1,4-diazepane-1-carboxylate
中文名称	(S)-叔丁基-2-甲基-1,4-氮杂环庚烷-1-羧酸
CAS 号	1035226-84-6
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	214.305
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-叔丁基-2-甲基-1,4-氮杂环庚烷-1-羧酸 (CAS 号: 1035226-84-6) 是一种具有光学活性的氮杂环化合物, 分子式为 $C_{11}H_{22}N_2O_2$, 分子量为 214.305。该化合物以(S)-构型存在, 纯度高于 96%, 外观通常为无色至淡黄色液体或固体。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和 1,4-二氮杂环庚烷骨架使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。该化合物在常温下稳定, 但需避免强酸、强碱及氧化剂环境。

2. 生物化学功能与重要性

(S)-叔丁基-2-甲基-1,4-氮杂环庚烷-1-羧酸作为一种手性中间体, 常用于构建具有生物活性的分子。其 1,4-二氮杂环庚烷结构是许多药物分子的核心药效团, 尤其在神经递质调节剂和酶抑制剂设计中表现突出。该化合物的手性中心可显著影响其与生物靶点的相互作用, 因此在不对称合成和药物开发中具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和精细化工领域。具体用途包括:

- 作为手性砌块用于合成抗抑郁、抗焦虑等中枢神经系统药物。
- 用于构建蛋白酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的中间体。
- 在不对称催化反应中作为配体或辅助试剂。
- 用于学术研究中的分子探针设计与构效关系研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、甲醇等有机溶剂, 可根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间质量稳定。安全信息提示:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 接触后应立即用大量清水冲洗。

- 非危险品运输，但需符合一般化学品运输规范。
- 废弃物处置应遵守当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处理。
- 具体毒理学数据尚未完全明确，建议在研究中采取标准实验室防护措施。