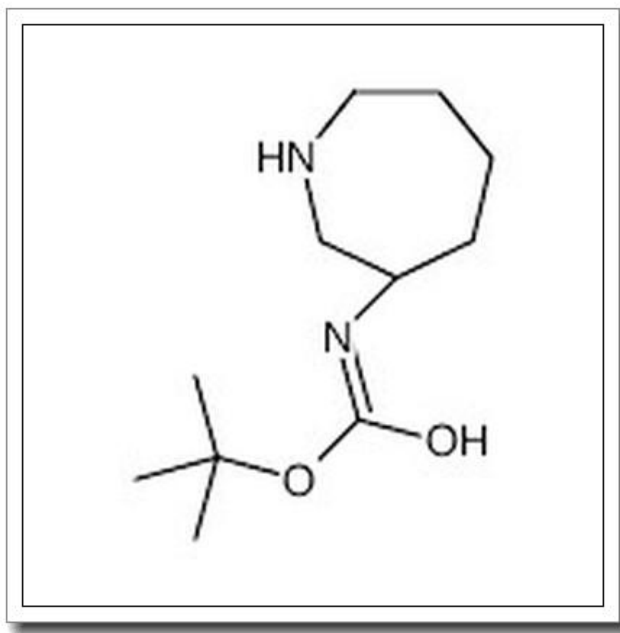


(S)-氮杂环庚烷-3-氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl N-[(3S)-azepan-3-yl]carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl N-[(3S)-azepan-3-yl]carbamate</i>
中文名称	(S)-氮杂环庚烷-3-氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	213990-48-8
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	214.305
纯度	>96%

产品说明

以下是专业的产品说明文档:

产品概述与化学特性

(S)-氮杂环庚烷-3-氨基甲酸叔丁酯 (CAS 213990-48-8) 是一种手性氮杂环有机化合物, 分子式为 $C_{11}H_{22}N_2O_2$, 分子量 214.305。该物质为白色至类白色结晶粉末, 具有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团和 (S)-构型的氮杂环庚烷骨架。其化学结构中同时含有氨基甲酸酯键和七元环胺结构, 这种特殊构型使其在有机合成中表现出优异的立体选择性和反应活性。产品经 HPLC 检测纯度 $>96\%$, 符合生化试剂标准。

生物化学功能与重要性

作为重要的手性砌块, 该化合物能通过 Boc 基团的定向脱保护实现氨基的选择性修饰。其刚性环状结构可稳定蛋白质二级构象, 在肽类化合物合成中常用于引入构象限制。氮杂环庚烷骨架具有类似天然生物碱的构型特征, 使其成为药物设计中模拟生物活性分子的关键中间体。该产品在立体选择性合成领域尤为重要, 可显著提高目标产物的光学纯度。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 作为 HIV 蛋白酶抑制剂、抗病毒药物及镇痛剂合成的手性中间体
2. 不对称催化: 用于构建手性配体的核心骨架
3. 肽类修饰: 在固相肽合成中引入构象限制性氨基酸类似物
4. 材料科学: 制备具有光学活性的功能高分子单体

典型应用包括但不限于: 与羧酸衍生物缩合制备酰胺键、在酸性条件下脱 Boc 保护后进一步官能团化、作为过渡金属催化反应的配体前体。

储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于 -20°C 干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体。开封后应在干燥氮气环境下分装使用, 避免反复冻融。使用前需恢复至室温并保持环境干燥, 建议在通风橱中操作。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微

溶于醇类，水溶性差。工作溶液建议现配现用，剩余溶液需在-20℃保存不超过 72 小时。

质量控制与安全信息

本产品通过 MS、NMR 和 HPLC 三重验证，确保结构准确性和高纯度。残留溶剂符合 ICH Q3C 标准，重金属含量 < 10ppm。安全数据表明该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴防护眼镜和丁腈手套。如接触皮肤，需立即用大量清水冲洗。废弃物处置应遵守当地危险化学品处理法规，不可直接排入下水道。详细安全信息请参阅随货提供的 MSDS 证书。