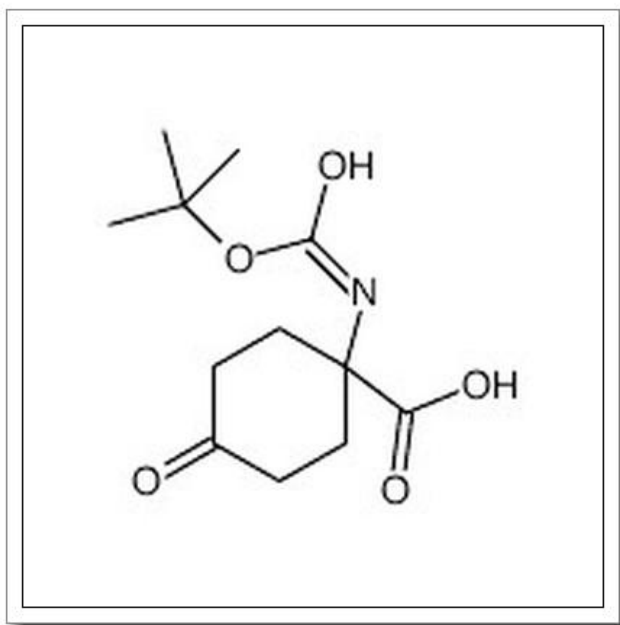


# 1-叔丁氧基羰基氨基-4-氧代-环己烷羧酸

*1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid
中文名称	1-叔丁氧基羰基氨基-4-氧代-环己烷羧酸
CAS 号	285996-76-1
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>05</sub>
分子量	257.283
纯度	>96%

## 产品说明

### 1-叔丁氧基羰基氨基-4-氧代-环己烷羧酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid, 是一种具有特定保护基团的环己烷衍生物。其分子式为 C<sub>12</sub>H<sub>19</sub>N<sub>05</sub>, 分子量 257.283, CAS 号为 285996-76-1。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度经 HPLC 测定大于 96%。结构中同时含有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团和羧酸活性位点, 使其在有机合成中表现出独特的反应特性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为 Boc 保护的氨基环己酮羧酸衍生物, 该化合物在肽类合成和药物中间体制备中具有关键作用。Boc 基团在酸性条件下可选择性脱除, 而 4-位羰基与 1-位羧酸提供了双重修饰位点, 使其成为构建复杂杂环体系的重要砌块。其刚性环己烷骨架可显著改善最终产物的立体构型和代谢稳定性。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 新型抗生素和抗肿瘤药物的中间体合成
- 蛋白酶抑制剂类药物的结构修饰
- 不对称催化反应的手性配体制备
- 生物标记物连接臂的化学构建

典型应用包括通过酰胺键形成反应引入环己酮结构单元, 或经还原胺化反应构建含氮杂环体系。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃干燥避光条件下长期储存, 短期使用可存放于 2-8℃环境。开封后需充入惰性气体保护, 避免反复冻融。使用时应注意:

- 溶解性测试表明易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂

- 在强酸强碱条件下可能发生 Boc 基团脱落或环己酮结构变化
- 建议在通风橱中操作，避免直接接触皮肤

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经严格质控，包括：

- HPLC 纯度检测 ( $\geq 96\%$ )
- 核磁共振氢谱验证结构
- 重金属含量检测 ( $< 10\text{ppm}$ )

安全数据：

- 危害分类：刺激性物质 (Category 2)
- 个人防护要求：实验服、护目镜和防尘口罩
- 应急处理：皮肤接触时立即用大量清水冲洗
- 废弃物处理：按有机危险废物处置规范处理

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗用途。具体使用方案建议参考文献报道的合成方法或咨询专业技术支持。