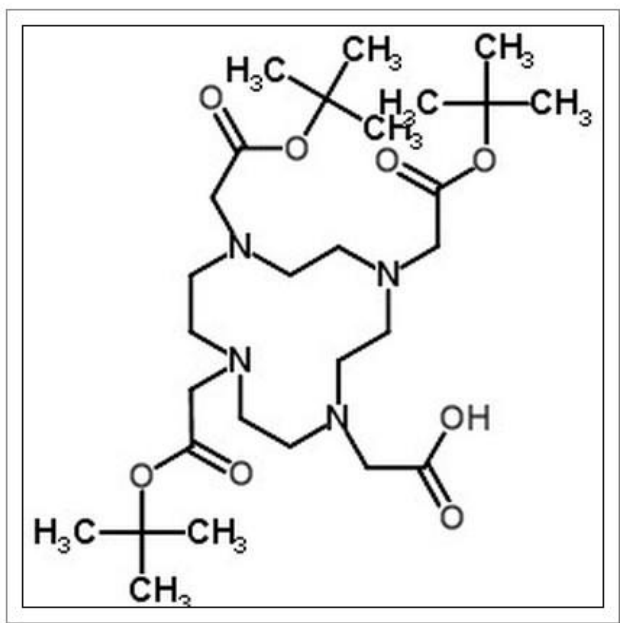


1,4,7,10-四氮杂环十二烷-1,4,7,10-四乙酸三叔丁酯

2-[4, 7, 10-tris[2-[(2-methylpropan-2-yl)oxy]-2-oxoethyl]-1, 4, 7, 10-tetrazacyclododec-1-yl]acetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[4, 7, 10-tris[2-[(2-methylpropan-2-yl)oxy]-2-oxoethyl]-1, 4, 7, 10-tetrazacyclododec-1-yl]acetic acid
中文名称	1, 4, 7, 10-四氮杂环十二烷-1, 4, 7, 10-四乙酸三叔丁酯
CAS 号	137076-54-1
分子式	C ₂₈ H ₅₂ N ₄ O ₈
分子量	572.734
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 2-[4, 7, 10-三(2-[(2-甲基丙-2-基)氧基]-2-氧代乙基)-1, 4, 7, 10-四氮杂环十二烷-1-基]乙酸, 中文名称为 1, 4, 7, 10-四氮杂环十二烷-1, 4, 7, 10-四乙酸三叔丁酯, CAS 号为 137076-54-1。其分子式为 $C_{28}H_{52}N_4O_8$, 分子量为 572.734, 纯度高于 96%。该化合物是一种多齿配体, 具有四氮杂环十二烷骨架结构, 并通过叔丁酯保护羧酸基团, 表现出优异的金属离子螯合能力。其化学稳定性高, 在常温下为白色至类白色固体, 易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该产品作为大环多胺衍生物, 能够与多种过渡金属离子 (如钆、铜、锌等) 形成稳定的配合物, 尤其在放射性核素标记和磁共振成像 (MRI) 对比剂领域具有重要价值。其叔丁酯保护基团可选择性脱保护, 进一步衍生化, 为定制化螯合剂设计提供灵活性。此外, 其高亲和力和选择性使其成为生物偶联和分子探针开发的理想工具。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于生物医学研究和诊断领域。在放射性药物中, 用于镓-68、铜-64 等核素的标记, 支持正电子发射断层扫描 (PET) 成像。在 MRI 领域, 可作为钆 (III) 螯合剂的前体, 用于合成高弛豫效率的对比剂。此外, 它还用于金属酶模拟研究、荧光标记探针的构建, 以及作为有机合成中间体参与多肽修饰和药物递送系统开发。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 长期保存需置于惰性气体 (如氩气) 环境中以防止氧化。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。溶解时建议使用无水有机溶剂, 并在惰性气氛下操作以保护叔丁酯基团。实验过程中需佩戴防护手套和护目镜, 确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和质谱分析验证纯度 (>96%)，并提供批次特异性 COA。其叔丁酯基团在酸性条件下易水解，需避免接触强酸或强氧化剂。安全数据表 (SDS) 显示，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应遵循实验室安全规范。废弃物需按危险化学品处理，禁止直接排放至环境中。