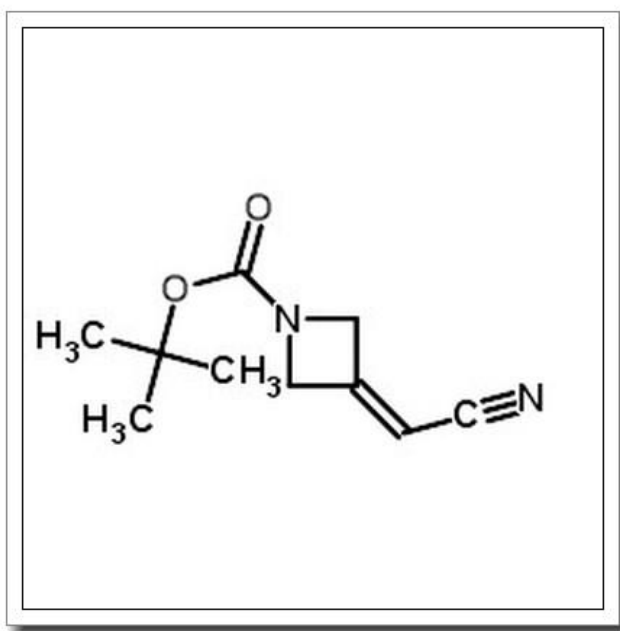


3-(氰基亚甲基)氮杂丁烷-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 3-(cyanomethylidene)azetidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-(cyanomethylidene)azetidine-1-carboxylate
中文名称	3-(氰基亚甲基)氮杂丁烷-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1153949-11-1
分子式	C10H14N2O2
分子量	194.23
纯度	>96%

产品说明

3-(氰基亚甲基)氮杂丁烷-1-羧酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl 3-(cyanomethylidene)azetidine-1-carboxylate, 中文名称为 3-(氰基亚甲基)氮杂丁烷-1-羧酸叔丁酯, CAS 号为 1153949-11-1。其分子式为 C₁₀H₁₄N₂O₂, 分子量为 194.23, 纯度高于 96%。该化合物为含氮杂环衍生物, 结构中含有氰基亚甲基和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 具有较高的反应活性, 适合作为有机合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为氮杂环丁烷类化合物, 其在药物化学和生物活性分子合成中具有重要价值。氰基亚甲基的引入可增强分子的亲电性, 便于后续衍生化反应; Boc 保护基则提供了良好的稳定性与脱保护选择性。这类结构片段常见于蛋白酶抑制剂、抗菌剂及抗癌药物的研发中, 是构建复杂生物活性分子的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体合成, 尤其在以下领域表现突出:

- 药物研发: 作为小分子靶向药物的核心骨架, 用于修饰活性位点。
- 农药化学: 参与合成具有生物活性的含氮杂环化合物。
- 材料科学: 作为功能化单体, 用于制备特殊性能的高分子材料。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存, 长期存放需充入惰性气体 (如氮气) 保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 建议在通风橱中配制溶液。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测, 纯度 ≥ 96%。使用时需注意:

- 安全防护: 佩戴护目镜及防化手套, 避免吸入粉尘或接触皮肤。

- 应急处理：若接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排放。

本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件进一步优化。