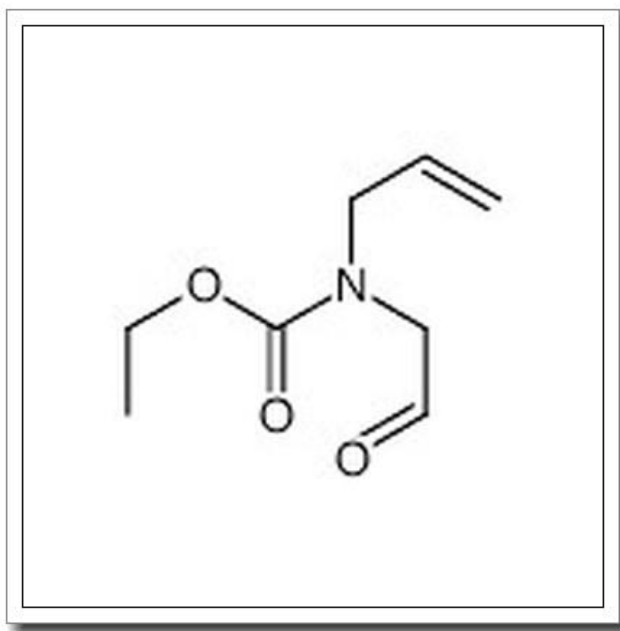


N-(2-氧代乙基)-N-丙烯基-2-氨基甲酸乙酯

ethyl N-(2-oxopent-4-enyl) carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl N-(2-oxopent-4-enyl) carbamate
中文名称	N-(2-氧代乙基)-N-丙烯基-2-氨基甲酸乙酯
CAS 号	128740-03-4
分子式	C ₈ H ₁₃ N ₃ O ₃
分子量	171.194
纯度	>96%

产品说明

N-(2-氧代乙基)-N-丙烯基-2-氨基甲酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 ethyl N-(2-oxopent-4-enyl)carbamate, CAS 号为 128740-03-4, 分子式为 C₈H₁₃N₀₃, 分子量为 171.194。该化合物是一种含烯烃和氨基甲酸酯结构的有机中间体, 常温下为无色至淡黄色液体, 具有特征性气味。其结构中同时包含活性烯键 (C=C) 和氨基甲酸乙酯基团, 使其在亲核加成和聚合反应中表现出独特反应性。纯度经 HPLC 测定 ≥96%, 水分含量低于 0.5%。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能合成砌块, 其分子中的 α, β-不饱和羰基结构可参与迈克尔加成反应, 而氨基甲酸酯基团在药物化学中常用于前药设计。该化合物在生物活性分子合成中具有关键作用, 特别是作为构建含氮杂环化合物的关键中间体, 可用于开发蛋白酶抑制剂和神经递质类似物。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于合成抗肿瘤和抗炎药物的先导化合物, 其烯键可作为后续衍生化的反应位点。在材料科学中, 可作为聚氨酯改性单体, 通过自由基聚合制备具有温敏特性的高分子材料。此外, 在农用化学品领域, 可用于合成具有杀虫活性的氨基甲酸酯类衍生物。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于 -20°C 至 4°C 的惰性气体 (如氩气) 环境中, 避免光照和湿度。开封后建议在干燥氮气保护下分装使用。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入蒸汽。溶解性测试表明, 本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水 (<0.1 g/L, 25°C)。

5. 质量控制与安全信息

本批次产品经 GC-MS 和 NMR 验证结构, 符合企业内控标准 (Q/STD-2023)。安全数据表明, 该物质对眼睛和呼吸道有刺激性 (GHS 分类: Eye Irrit. 2), 操作时应

佩戴护目镜和防毒面具。废弃物处理需遵循当地法规，建议采用碱性水解（ $\text{pH}>12$ ， 60°C ）进行降解。提供完整的 COA（分析证书）和 MSDS（材料安全数据表）备案。