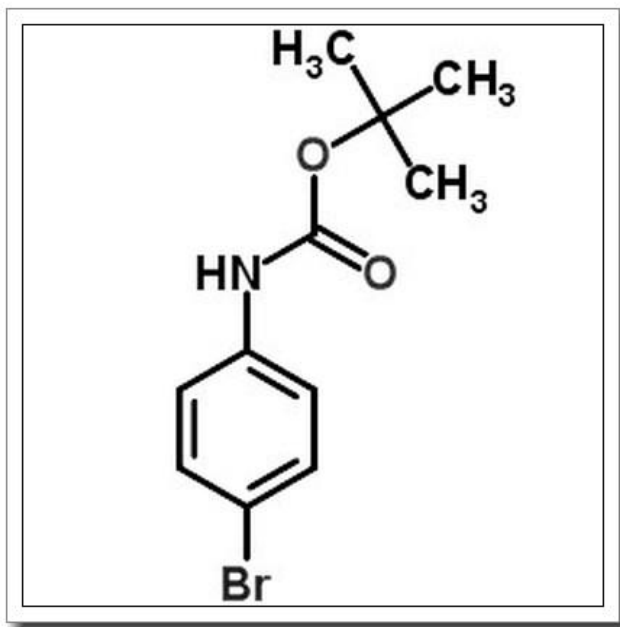


N-丁氧羰基-4-溴丙氨酸

tert-butyl n-(4-bromophenyl)-carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl n-(4-bromophenyl)-carbamate</i>
中文名称	N-丁氧羰基-4-溴丙氨酸
CAS 号	131818-17-2
分子式	C ₁₁ H ₁₄ BrNO ₂
分子量	272.138
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl n-(4-bromophenyl)-carbamate (N-叔丁氧羰基-4-溴丙氨酸) 是一种有机溴化合物, 化学式为 $C_{11}H_{14}BrNO_2$, 分子量为 272.138, CAS 号为 131818-17-2。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构包含一个叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团和一个 4-溴苯基, 使其在有机合成中具有较高的反应活性与稳定性。该化合物易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Boc 保护的芳香胺衍生物, 该化合物在肽合成和药物化学中扮演重要角色。Boc 基团可有效保护氨基, 避免其在多步合成中发生副反应, 同时可通过酸性条件 (如三氟乙酸) 选择性脱除。4-溴苯基的引入为其提供了进一步的官能团化潜力, 例如通过偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 构建复杂分子骨架。这类中间体广泛应用于抗癌、抗病毒等药物研发中。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和生物化学研究领域。在药物开发中, 它是合成蛋白酶抑制剂、激酶抑制剂的重要中间体。此外, 在材料科学中可用于制备功能性高分子单体。具体用途包括: 1) 作为 Boc 保护的前体用于固相肽合成; 2) 通过溴基团参与钯催化交叉偶联反应, 构建联芳结构; 3) 用于开发靶向药物的结构修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。开封后应避免反复冻融, 以防吸湿降解。使用时需在干燥惰性气氛 (如氩气手套箱) 中操作, 若需溶解推荐使用无水级有机溶剂。实验后剩余物料应立即密封, 并标注开瓶日期。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 同时满足核磁共振 (1H NMR) 和质谱 (MS) 的结

构确证要求。安全方面，该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废料处理，遵守当地环保法规。

（注：实际产品说明需根据具体检测报告补充批次相关数据，本文为通用模板。）