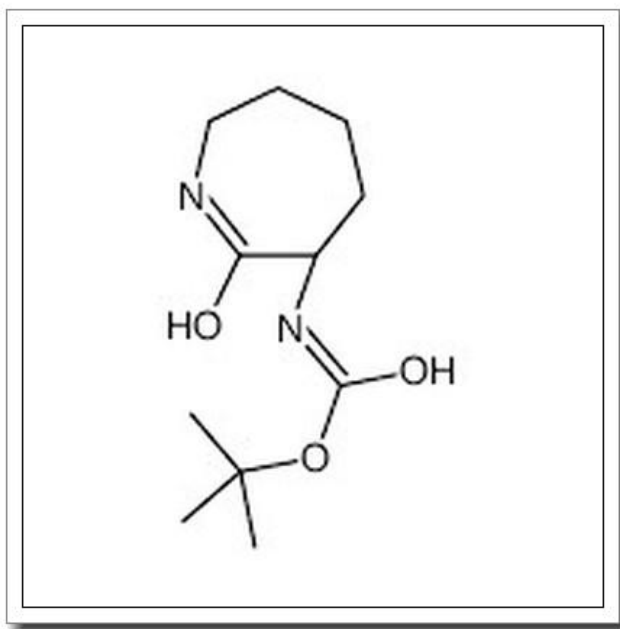


# (R)-(2-氧代氮杂环庚烷-3-基)氨基甲酸叔丁酯

*(R)-tert-Butyl (2-oxoazepan-3-yl) carbamate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-tert-Butyl (2-oxoazepan-3-yl) carbamate
中文名称	(R)-(2-氧代氮杂环庚烷-3-基)氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	106691-72-9
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量	228.288
纯度	>96%

## 产品说明

### (R)-叔丁基(2-氧代氮杂环庚烷-3-基)氨基甲酸酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为手性氮杂环化合物，化学名称为(R)-tert-Butyl (2-oxoazepan-3-yl) carbamate，中文系统命名为(R)-(2-氧代氮杂环庚烷-3-基)氨基甲酸叔丁酯，CAS 号 106691-72-9。其分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>，分子量 228.288，纯度 ≥96%。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，具有明确的立体构型(R型)，结构中包含七元氮杂环(azepane)骨架、叔丁氧羰基(Boc)保护基团及酰胺键，这些特征使其在有机合成中表现出独特的反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块，(R)-构型赋予该分子在不对称合成中的定向诱导能力。其 Boc 保护基可选择性脱除，为氨基官能团的后续修饰提供便利。2-氧代氮杂环庚烷结构模拟了部分生物活性分子的核心骨架，使其在蛋白酶抑制剂设计和药物中间体合成中具有重要价值。该化合物常作为关键前体用于构建复杂杂环体系或手性催化剂配体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- 3.1 医药研发：作为 HIV 蛋白酶抑制剂、凝血酶抑制剂等靶向药物的手性合成中间体。
- 3.2 不对称催化：用于制备金属催化剂的配体，调控立体选择性反应。
- 3.3 多肽修饰：通过 Boc 保护/脱保护策略引入构象限制性氨基酸类似物。
- 3.4 材料科学：作为功能化聚合物的单体组分，改善材料机械性能。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃下密封保存于干燥惰性气体(如氩气)环境中，避免光照及湿度波动。开封后需充氮保护并尽快使用。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于醇类，水溶性差。实验操作建议在通风橱中进行，使用惰性溶剂配制溶液时可适当加热至 40-50℃促进溶解。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，手性 HPLC 分析 ee 值  $> 99\%$ 。MS 及  $^1\text{H}$  NMR 谱图符合标准品特征。安全数据：急性毒性（LD50 大鼠口服） $> 2000$  mg/kg，但可能引起眼睛和皮肤刺激。操作时需佩戴防护眼镜、丁腈手套，避免吸入粉尘。废弃物应作为有害化学品处置，符合当地环保法规。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。