

(S)-tert-Butyl 2-methyl-1,4-diazepane-1-carboxylate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-tert-Butyl 2-methyl-1,4-diazepane-1-carboxylate
产品目录号	
CAS 号	1035226-84-6
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	214.305
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-tert-Butyl 2-methyl-1,4-diazepane-1-carboxylate (CAS 号: 1035226-84-6) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{11}H_{22}N_2O_2$, 分子量为 214.305。该产品为白色至类白色固体, 纯度超过 96%, 属于 1,4-二氮杂萘类衍生物, 具有手性中心 (S 构型)。其化学结构中包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 赋予其良好的稳定性和溶解性, 适用于有机合成和药物研发中的中间体制备。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性二氮杂萘骨架的核心结构, 在生物活性分子设计中具有重要价值。其刚性环状结构和氮原子配位能力使其成为构建蛋白酶抑制剂、GPCR 配体及神经递质类似物的关键模块。Boc 保护基的存在可选择性脱除, 便于后续官能团化反应, 在肽类化合物和杂环药物的合成中广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

1. 药物研发: 作为 HIV 蛋白酶抑制剂、镇痛剂或抗焦虑药物的手性中间体。
2. 不对称合成: 用于构建含氮杂环的复杂分子, 如天然产物全合成。
3. 生化探针开发: 通过结构修饰制备靶向特定酶或受体的探针分子。

典型实验包括 Boc 保护/脱保护反应、环化反应及亲核取代反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体 (如氩气) 环境下密封保存, 避免光照和湿度。使用前需恢复至室温并通氮气保护, 防止降解。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性较低。实验操作应在通风橱中进行, 并避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

产品经 HPLC、NMR 和质谱严格验证, 确保结构准确性与纯度达标。安全数据表明:

1. 危害标识: 可能造成皮肤刺激 (H315) 和眼刺激 (H319)。

2. 防护措施: 佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。
3. 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗, 眼部接触需用生理盐水冲洗 15 分钟。

废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地环保法规。

(注: 实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 以获取完整安全信息。)