

tert-butyl {(1R,2S,5S)-2-amino-5- [(dimethylamino)carbonyl]cyclohexyl}ca rbamate monooxalate monohydrate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl {(1R, 2S, 5S)-2-amino-5- [(dimethylamino) carbonyl]cyclohexyl} carbamate monooxalate monohydrate
产品目录号	
CAS 号	1353893-22-7
分子式	C16H31N3O8
分子量	393. 433
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl {(1R, 2S, 5S)-2-amino-5-[(dimethylamino)carbonyl]cyclohexyl} carbamate monooxalate monohydrate, CAS 号 1353893-22-7。其分子式为 C₁₆H₃₁N₃O₈，分子量 393.433，纯度高于 96%。该化合物属于氨基甲酸酯类衍生物，结构中包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团和二甲氨基羰基修饰的环己烷骨架，同时以一水合单草酸盐形式存在，具有良好的溶解性和稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中作为关键中间体，常用于多肽合成和药物开发领域。其 Boc 保护基团可选择性脱除，便于后续官能团修饰；二甲氨基羰基结构赋予其特定空间构象，可能影响与生物靶点的相互作用。在蛋白酶抑制剂和受体调节剂的研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，具体用途包括：1) 作为小分子药物先导化合物，用于抗肿瘤或神经退行性疾病研究；2) 用于构建手性催化剂或配体；3) 在固相多肽合成中作为保护氨基酸衍生物。实验室级产品适用于高通量筛选和结构活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 -20° C 干燥避光环境中，开封后需充氮密封保存。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。溶解时可选用二甲基亚砜 (DMSO) 或乙醇，推荐浓度不超过 10 mM。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 双重验证纯度，批次间差异小于 2%。该产品属于刺激性化学品，安全数据如下：1) 眼睛接触可能引起严重刺激，需立即用大量清水冲洗；2) 操作

时应佩戴护目镜和防尘口罩；3) 废弃物需按危险化学品规范处置。详细安全信息请参阅随附的MSDS（材料安全数据表）。

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床或食品领域。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规范。