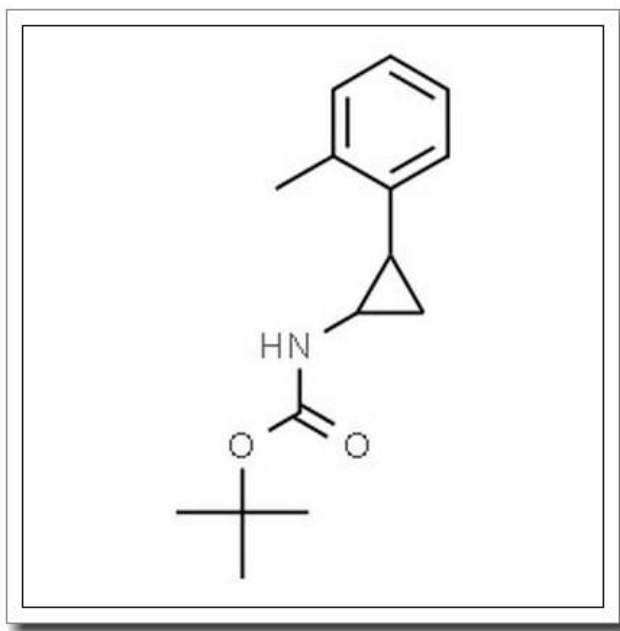


(反式-2-(邻甲苯基)环丙基)氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl (trans-2-(o-tolyl)cyclopropyl) carbamate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | tert-butyl (trans-2-(o-tolyl)cyclopropyl) carbamate |
| 中文名称 | (反式-2-(邻甲苯基)环丙基)氨基甲酸叔丁酯 |
| CAS 号 | 1859949-36-2 |
| 分子式 | C ₁₅ H ₂₁ N ₂ O ₂ |
| 分子量 | 247.33 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

(反式-2-(邻甲苯基)环丙基)氨基甲酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl (trans-2-(o-tolyl)cyclopropyl) carbamate, 中文名称为(反式-2-(邻甲苯基)环丙基)氨基甲酸叔丁酯, CAS 号为 1859949-36-2, 分子式为 C₁₅H₂₁N₀₂, 分子量为 247.33。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有明确的立体构型(反式结构)。其化学结构中包含叔丁氧羰基(Boc)保护基团和邻甲苯基取代的环丙烷骨架, 赋予其良好的稳定性和特定的空间位阻效应。

2. 生物化学功能与重要性

作为环丙烷类衍生物, 该化合物在有机合成和药物化学中具有重要价值。Boc 保护基团可选择性脱除, 使其成为氨基保护策略中的关键中间体。其独特的环丙烷结构能够模拟肽键的刚性构象, 常用于肽类药物的修饰或作为构效关系研究的工具分子。此外, 邻甲苯基的引入可能增强其脂溶性, 适用于跨膜传递相关研究。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 用于小分子抑制剂或受体调节剂的合成, 尤其在抗肿瘤和抗炎药物开发中具有潜力。
- 有机合成: 作为手性砌块参与不对称合成, 构建复杂环状化合物。
- 保护基化学: Boc 基团在固相肽合成(SPPS)中保护氨基, 避免副反应发生。
- 材料科学: 可能用于功能化高分子材料的改性研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下密封保存于干燥、避光环境中, 长期储存需充惰性气体保护。使用时恢复至室温再开盖, 避免吸湿。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性较差。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

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。如意外接触眼睛，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。更多安全信息请参阅具体材料安全数据表 (MSDS)。