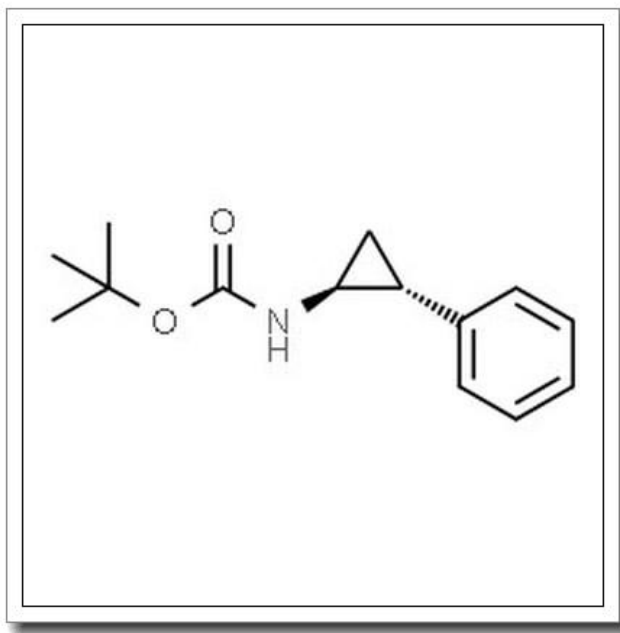


反式叔丁基-2-苯基环丙基氨基甲酸酯

tert-butyl ((1S, 2R)-2-phenylcyclopropyl)carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl ((1S, 2R)-2-phenylcyclopropyl)carbamate</i>
中文名称	反式叔丁基-2-苯基环丙基氨基甲酸酯
CAS 号	185256-49-9
分子式	C ₁₄ H ₁₉ N ₂ O ₂
分子量	233.30616
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

反式叔丁基-2-苯基环丙基氨基甲酸酯 (tert-butyl ((1S, 2R)-2-phenylcyclopropyl) carbamate) 是一种具有特定立体构型的环丙基氨基甲酸酯类化合物, CAS 号为 185256-49-9。其分子式为 C₁₄H₁₉N₀O₂, 分子量为 233.30616, 纯度通常高于 96%。该化合物以白色或类白色固体形式存在, 具有明确的立体化学结构 (1S, 2R 构型), 其叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团赋予其良好的化学稳定性和反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为氨基甲酸酯衍生物, 在有机合成和药物化学中具有重要价值。其 Boc 保护基可有效保护环丙胺结构中的氨基, 避免其在后续反应中被破坏。此外, 苯基环丙基骨架是多种生物活性分子的关键药效团, 常见于蛋白酶抑制剂、受体调节剂等药物设计中。其立体构型对生物活性的影响显著, 因此在手性药物开发中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

反式叔丁基-2-苯基环丙基氨基甲酸酯主要用于医药中间体和精细化学品的合成。

具体用途包括:

- 作为手性砌块, 用于构建抗病毒药物 (如 HCV 蛋白酶抑制剂) 或中枢神经系统药物。
- 在不对称催化反应中作为配体或底物, 参与 C-C 键或 C-N 键的构建。
- 用于研究环丙基氨基酸衍生物的代谢稳定性及生物活性。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光的环境中, 推荐储存温度为 2-8°C。长期储存建议充入惰性气体 (如氮气) 以延缓氧化。使用时需在干燥条件下操作, 避免接触强酸、强碱或氧化剂。溶解性测试表明, 其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并严格控制旋光纯度以确保立体构型的一致性。安全信息方面，该化合物可能对眼睛、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。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。