

[1-(2,5-二氟苯基)-1-氧代-4-戊炔-2-基] 氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl [1-(2,5-difluorophenyl)-1-oxopent-4-yn-2-yl]carbamate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl [1-(2,5-difluorophenyl)-1-oxopent-4-yn-2-yl]carbamate
中文名称	[1-(2,5-二氟苯基)-1-氧代-4-戊炔-2-基]氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	1172623-96-9
分子式	C ₁₆ H ₁₇ F ₂ N ₃ O ₃
分子量	309.308
纯度	≥ 96%

产品说明

[1-(2,5-二氟苯基)-1-氧代-4-戊炔-2-基]氨基甲酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl [1-(2,5-difluorophenyl)-1-oxopent-4-yn-2-yl]carbamate, 中文名称为[1-(2,5-二氟苯基)-1-氧代-4-戊炔-2-基]氨基甲酸叔丁酯, CAS 号为 1172623-96-9。其分子式为 C₁₆H₁₇F₂N₃O₃, 分子量为 309.308, 是一种白色至类白色结晶或粉末状化合物。该物质具有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团和炔烃官能团, 结构中的二氟苯基和炔键为其提供了独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为有机合成中间体, 该化合物在生物化学领域具有重要价值。Boc 保护基团可选择性脱除, 便于后续氨基修饰; 炔烃官能团可通过点击化学反应 (如铜催化的叠氮-炔环加成) 实现分子偶联。其结构中的二氟苯基能增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 常用于药物分子设计中优化药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 作为关键中间体用于合成靶向药物 (如激酶抑制剂) 或 PET 显影剂前体。
- 材料科学: 通过炔基反应构建功能化高分子材料或表面修饰。
- 化学生物学: 用于蛋白质标记或探针分子的合成, 研究生物分子相互作用。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 密封保存于 -20° C 至 4° C 干燥环境中, 避免光照与湿气。
- 使用建议: 在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 溶解时可选用二氯甲烷、DMF 等有机溶剂。建议现配现用, 避免长期暴露于空气中。

5. 质量控制与安全信息

- 纯度标准: 经 HPLC 检测确认纯度 ≥ 96%。
- 安全提示: 本品对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套及护目镜。若不

慎接触，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。

- 运输分类：非危险品，但建议按一般化学品规范运输。

注：本产品仅供科研用途，不适用于食品、药品或家庭用途。具体应用前请查阅最新文献并评估实验方案安全性。