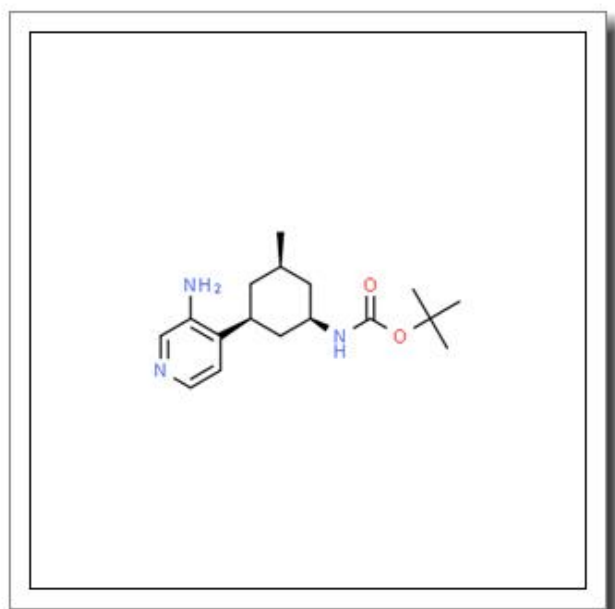


# ((1R,3S,5R)-3-(3-氨基吡啶-4-基)-5-甲基环己基)氨基甲酸叔丁酯

*Carbamic acid, N-[(1R, 3S, 5R)-3-(3-amino-4-pyridinyl)-5-methylcyclohexyl]-, 1,1-dimethylethyl ester*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Carbamic acid, N-[(1R, 3S, 5R)-3-(3-amino-4-pyridinyl)-5-methylcyclohexyl]-, 1,1-dimethylethyl ester
中文名称	((1R, 3S, 5R)-3-(3-氨基吡啶-4-基)-5-甲基环己基)氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	1664404-64-1
分子式	C <sub>17</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	305.41518
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### ((1R, 3S, 5R)-3-(3-氨基吡啶-4-基)-5-甲基环己基)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 Carbamic acid, N-[(1R, 3S, 5R)-3-(3-amino-4-pyridinyl)-5-methylcyclohexyl]-, 1,1-dimethylethyl ester, 是一种具有特定立体构型的氨基甲酸酯类化合物。其分子式为 C<sub>17</sub>H<sub>27</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 305.41518, CAS 号为 1664404-64-1。产品为白色至类白色固体, 纯度 ≥96%, 结构中含有氨基吡啶基团和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基, 具有较高的化学稳定性和溶解性, 适用于有机合成及药物研发。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体, 在药物化学中具有重要价值。其氨基吡啶结构可作为氢键供体或受体参与分子识别, 而 Boc 保护基能有效保护氨基在合成过程中免受副反应影响。此类结构常见于激酶抑制剂或神经调节剂的研发中, 尤其在靶向性药物设计中用于优化药效团的空间取向。

#### 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:

- 作为小分子靶向药物的关键合成砌块, 用于构建具有立体选择性的活性分子骨架。
- 用于激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的先导化合物优化, 改善化合物的代谢稳定性和选择性。
- 在学术研究中作为探针分子, 探索酶活性位点或受体结合机制。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中, 避免光照与湿气。长期储存建议充入惰性气体保护。

使用建议: 使用前恢复至室温并干燥处理。在无水惰性气氛 (如氮气或氩气) 下进行反应操作, 避免强酸强碱条件导致 Boc 基团脱落。

## 5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，同时提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）数据以确认结构。

安全信息：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。废弃物应按照国家危险化学品规范处置。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。具体应用需结合实验设计进一步验证。