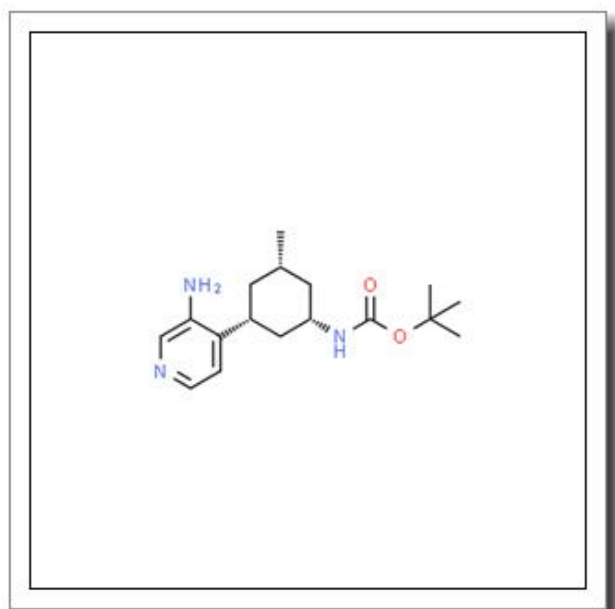


[(1S,3R,5S)-3-(3-氨基吡啶-4-基)-5-甲基环己基]氨基甲酸叔丁酯

tert-Butyl [(1S, 3R, 5S)-3-(3-aminopyridin-4-yl)-5-methylcyclohexyl]carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl [(1S, 3R, 5S)-3-(3-aminopyridin-4-yl)-5-methylcyclohexyl]carbamate</i>
中文名称	[(1S, 3R, 5S)-3-(3-氨基吡啶-4-基)-5-甲基环己基]氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	1187056-55-8
分子式	C ₁₇ H ₂₇ N ₃ O ₂
分子量	305.42
纯度	≥96%

产品说明

[(1S, 3R, 5S)-3-(3-氨基吡啶-4-基)-5-甲基环己基]氨基甲酸叔丁酯 (CAS 号: 1187056-55-8) 产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-Butyl [(1S, 3R, 5S)-3-(3-aminopyridin-4-yl)-5-methylcyclohexyl]carbamate，分子式 C₁₇H₂₇N₃O₂，分子量 305.42。其结构包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团、氨基吡啶基团及甲基环己基骨架，具有立体专一性 (1S, 3R, 5S 构型)。纯度 ≥96%，可通过 HPLC 或 NMR 验证。该化合物在有机溶剂 (如 DMSO、甲醇) 中溶解性良好，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性氨基环己基衍生物，本品是医药中间体领域的关键构建模块。其 Boc 保护基团可选择性脱除，暴露游离氨基以进一步衍生化；3-氨基吡啶基团则赋予其配位能力和生物活性，常用于靶向蛋白激酶或核酸结合蛋白的分子设计。在药物化学中，此类结构常用于优化化合物的细胞渗透性和代谢稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发：作为小分子抑制剂或拮抗剂的合成前体，尤其适用于抗肿瘤、抗炎药物开发。
- 化学探针：用于研究酶活性位点或受体结合机制的工具分子。
- 不对称合成：作为手性催化剂或配体的中间体，参与立体选择性反应。

4. 储存条件与使用建议

- 储存：密封保存于 -20° C 干燥环境中，避免光照与湿气。长期储存建议充入惰性气体 (如氮气)。
- 使用：溶解前需恢复至室温以防止结露。建议在通风橱中操作，使用干燥溶剂以避免 Boc 基团水解。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：批次提供 HPLC 纯度报告、MS 及 ^1H NMR 谱图。
- 安全提示：可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护装备。非药用级，仅限研究用途。废弃物应按照国家有机胺类化合物规范处置。

本品需在专业人员指导下使用，具体应用请参考相关文献或技术协议。