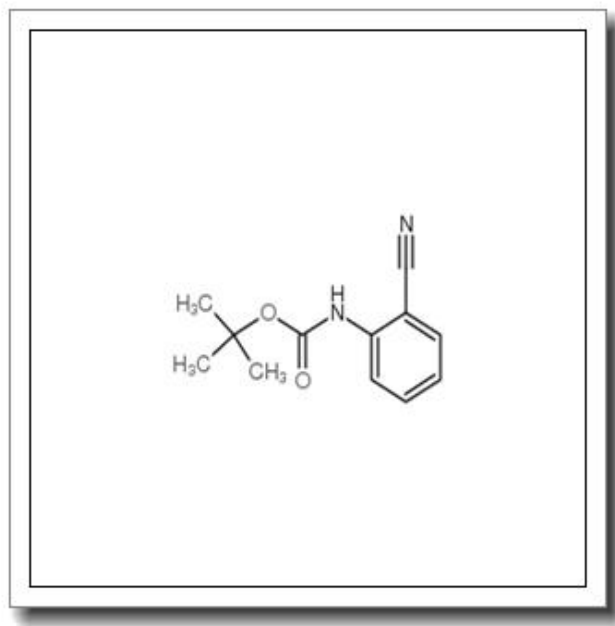


2-氰基苯基氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl N-(2-cyanophenyl)carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl N-(2-cyanophenyl)carbamate
中文名称	2-氰基苯基氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	163229-43-4
分子式	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂
分子量	218.252
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-氰基苯基氨基甲酸叔丁酯 (tert-butyl N-(2-cyanophenyl)carbamate) 是一种有机化合物, CAS 号为 163229-43-4, 分子式为 $C_{12}H_{14}N_2O_2$, 分子量为 218.252。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常不低于 96%。其结构中含有氰基 (-CN) 和氨基甲酸叔丁酯 (-NHCOOtBu) 官能团, 具有较高的化学稳定性和反应活性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

2-氰基苯基氨基甲酸叔丁酯在生物化学领域主要作为中间体用于药物合成和生物活性分子的构建。其氰基和氨基甲酸酯结构使其成为重要的保护基团或反应底物, 尤其在肽类化合物和杂环化合物的合成中具有广泛应用。该化合物在药物研发中常用于构建具有生物活性的分子骨架, 是许多抗癌、抗炎和抗菌药物合成中的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药领域, 它常用于合成蛋白酶抑制剂、激酶抑制剂等小分子药物; 在农药领域, 可作为杀虫剂或除草剂的中间体; 在材料科学中, 可用于功能高分子材料的合成。此外, 它还用于学术研究中的有机合成方法学开发, 为复杂分子的构建提供高效路径。

4. 储存条件与使用建议

2-氰基苯基氨基甲酸叔丁酯应密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。推荐储存温度为 2-8°C, 长期保存需置于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用时需佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。操作应在通风良好的化学通风橱中进行, 避免与强氧化剂或强酸接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 进行质量控制, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。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, 使用时需

严格遵守实验室安全规范。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物应按照当地法规进行专业处理，避免环境污染。