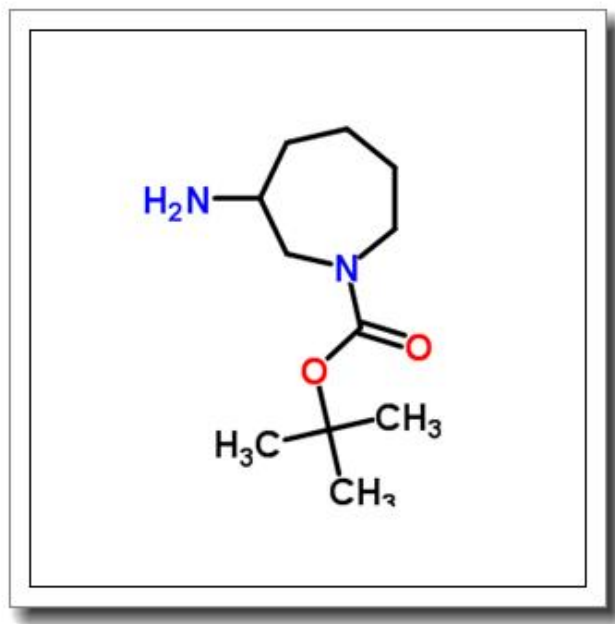


3-氨基氮杂环庚烷-1-甲酸叔丁酯

tert-Butyl 3-aminoazepane-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 3-aminoazepane-1-carboxylate
中文名称	3-氨基氮杂环庚烷-1-甲酸叔丁酯
CAS 号	609789-17-5
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	214.305
纯度	≥96%

产品说明

3-氨基氮杂环庚烷-1-甲酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-氨基氮杂环庚烷-1-甲酸叔丁酯 (tert-Butyl 3-aminoazepane-1-carboxylate, CAS 号: 609789-17-5) 是一种含氮杂环化合物, 分子式为 C₁₁H₂₂N₂O₂, 分子量为 214.305。该化合物以叔丁氧羰基 (Boc) 保护氨基为特征, 纯度 ≥96%, 常温下为白色至类白色固体或油状液体。其结构中的七元氮杂环和伯氨基使其成为有机合成中重要的中间体, 兼具亲核性和碱性, 可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、乙醇和乙酸乙酯。

2. 生物化学功能与重要性

作为氮杂环庚烷衍生物, 该化合物在药物化学中具有显著价值。Boc 保护基团可选择性脱除, 便于后续官能团修饰。其刚性环结构与氨基的协同作用, 使其成为构建生物活性分子 (如蛋白酶抑制剂、受体调节剂) 的关键骨架, 尤其在神经递质类似物和抗肿瘤药物研发中应用广泛。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 用于合成小分子靶向药物, 如 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 配体或激酶抑制剂。
- 多肽修饰: 作为非天然氨基酸前体, 引入环状结构以增强肽类化合物的代谢稳定性。
- 材料科学: 参与制备功能性高分子单体, 改善材料机械性能或生物相容性。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于 2-8°C、干燥惰性气体 (如氮气) 保护的密闭容器中, 避免吸湿和光照。
- 使用前需恢复至室温并充分干燥, 建议在通风橱中操作。Boc 基团对酸敏感, 避免接触强酸性环境。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 测定纯度 (≥96%), 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证

结构。

- 安全提示：穿戴防护手套和护目镜，避免吸入或皮肤接触。若接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物按危险化学品规范处置。

本产品仅供科研用途，不适用于医药或食品领域。具体使用需结合实验方案评估风险。