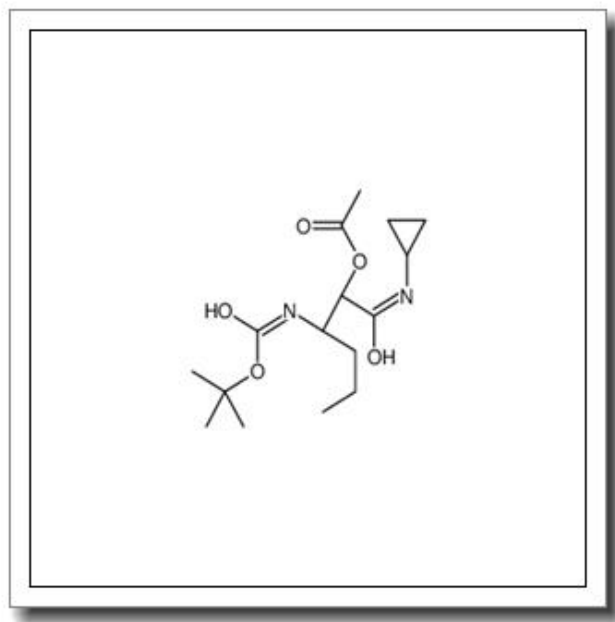


[(3S)-1-(cyclopropylamino)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-1-oxohexan-2-yl] acetate

[(3S)-1-(cyclopropylamino)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-1-oxohexan-2-yl] acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	[(3S)-1-(cyclopropylamino)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-1-oxohexan-2-yl] acetate
中文名称	[(3S)-1-(cyclopropylamino)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-1-oxohexan-2-yl] acetate
CAS 号	856707-38-5
分子式	C ₁₆ H ₂₈ N ₂ O ₅
分子量	328.404

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为[(3S)-1-(环丙基氨基)-3-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基氨基]-1-氧代己烷-2-基]乙酸酯, CAS 号为 856707-38-5, 分子式为 C₁₆H₂₈N₂O₅, 分子量为 328.404。该化合物是一种手性有机分子, 具有明确的立体构型 (3S), 结构中包含环丙基氨基、叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团以及乙酰氧基等官能团。其纯度 ≥96%, 通常以白色至类白色固体形式存在, 需通过核磁共振 (NMR) 和高效液相色谱 (HPLC) 进行结构确认与纯度分析。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中常作为中间体或前体分子, 用于合成更复杂的生物活性分子。其 Boc 保护基团可选择性脱除, 便于后续氨基的修饰与偶联反应。环丙基结构可能赋予其特殊的空间位阻效应, 在药物设计中用于调节分子与靶点的相互作用。此外, 乙酰氧基的存在使其可能参与酯酶介导的代谢过程, 在药物代谢研究中具有一定价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域, 具体包括:

- 作为蛋白酶抑制剂或受体调节剂的合成中间体, 用于抗肿瘤或抗感染药物开发。
- 在肽类化合物修饰中, 用于引入环丙基或 Boc 保护基团, 优化药物稳定性和生物利用度。
- 作为手性模板, 用于不对称合成或催化剂设计。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥保存, 长期储存需充惰性气体 (如氮气) 保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免接触水分或强酸/强碱环境, 以防 Boc 基团分解或分子降解。溶解性测试表明其可溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 使用时需根据实验需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并提供 COA（质量分析证书）。操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服，避免吸入粉尘或直接接触皮肤。若意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。其毒理学数据尚未完全明确，建议在通风橱中处理，并遵守实验室废弃物处理规范。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。