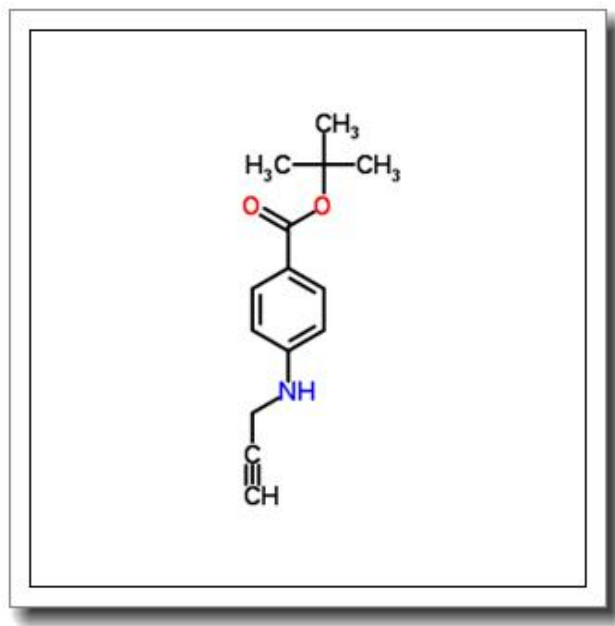


4-(2-丙炔氨基)苯甲酸叔丁酯

tert-butyl 4-(prop-2-ynylamino)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-(prop-2-ynylamino)benzoate</i>
中文名称	4-(2-丙炔氨基)苯甲酸叔丁酯
CAS 号	112888-76-3
分子式	C ₁₄ H ₁₇ N ₂ O ₂
分子量	231.29
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-(2-丙炔氨基)苯甲酸叔丁酯 (tert-butyl 4-(prop-2-ynylamino)benzoate) 是一种有机化合物, CAS 号为 112888-76-3, 分子式为 $C_{14}H_{17}NO_2$, 分子量为 231.29。该化合物为白色至类白色固体, 纯度通常不低于 96%。其结构中含有苯甲酸叔丁酯骨架和丙炔氨基官能团, 具有较高的反应活性, 尤其在炔基参与的点击化学反应中表现突出。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有重要应用价值。其炔基官能团可通过铜催化的叠氮-炔环加成反应 (CuAAC) 与叠氮化物高效结合, 广泛应用于生物共轭、标记和探针合成。此外, 叔丁酯基团在酸性条件下可选择性脱保护, 生成游离羧酸, 进一步拓展了其在多肽合成和药物修饰中的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

4-(2-丙炔氨基)苯甲酸叔丁酯主要用于医药研发和生物化学研究领域。具体用途包括: 作为中间体用于合成靶向药物分子; 在蛋白质标记和荧光探针制备中作为连接单元; 用于构建功能化材料, 如高分子聚合物和纳米载体。其高反应活性使其成为点击化学工具箱中的重要成员。

4. 储存条件与使用建议

该产品需避光保存于干燥、阴凉的环境中, 推荐储存温度为 2-8°C。长期储存建议充入惰性气体 (如氮气) 以保持稳定性。使用时应避免与强氧化剂接触, 并在通风良好的条件下操作。溶解时可选用二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 溶液现配现用为宜。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质量分析证书 (COA)。安全方面, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。若不

慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。