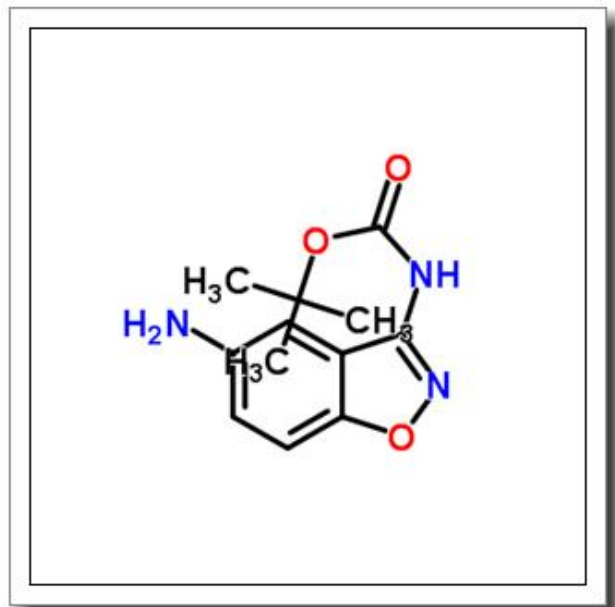


(5-氨基苯并[d]异恶唑-3-基)氨基甲酸叔丁酯

tert-Butyl (5-aminobenzo[d]isoxazol-3-yl) carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl (5-aminobenzo[d]isoxazol-3-yl) carbamate
中文名称	(5-氨基苯并[d]异恶唑-3-基)氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	380629-73-2
分子式	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O ₃
分子量	249.266
纯度	≥96%

产品说明

5-氨基苯并[d]异恶唑-3-基)氨基甲酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-Butyl (5-aminobenzo[d]isoxazol-3-yl)carbamate, CAS 号为 380629-73-2, 分子式 C₁₂H₁₅N₃O₃, 分子量 249.266, 是一种白色至类白色结晶粉末。其结构包含苯并异恶唑骨架与叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 纯度 ≥96%

(HPLC)。该化合物在常温下稳定, 易溶于二甲基亚砷 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为氨基苯并异恶唑的 Boc 保护衍生物, 该产品在药物化学中具有重要价值。Boc 基团可选择性脱保护生成游离氨基, 使其成为合成激酶抑制剂、抗肿瘤化合物等活性分子的关键中间体。其苯并异恶唑结构赋予分子刚性, 常被用于优化先导化合物的药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药研发: 用于构建 EGFR、ALK 等靶点的小分子抑制剂核心结构。

3.2 材料科学: 作为光敏材料或液晶材料的合成前体。

3.3 学术研究: 在有机合成方法学中作为杂环构建模块使用。

典型应用案例包括帕唑帕尼类似物的合成及 DNA 嵌入剂的结构修饰。

4. 储存条件与使用建议

4.1 储存条件: 密封保存于 -20℃ 干燥环境中, 避免光照与湿气。

4.2 复溶建议: 使用前需恢复至室温, 推荐以无水 DMSO 配制母液 (10-50 mM)。

4.3 操作防护: 需在通风橱中操作, 佩戴防尘口罩与丁腈手套。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度, NMR 与 LC-MS 验证结构。

5.2 安全数据: 急性毒性 LD₅₀ (大鼠口服) >2000 mg/kg, 属于刺激性化学品。

5.3 应急处置：皮肤接触时立即用肥皂水冲洗，眼睛接触需用生理盐水冲洗 15 分钟。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。建议使用者具备有机化学实验经验，并查阅相关 MSDS 获取完整安全信息。