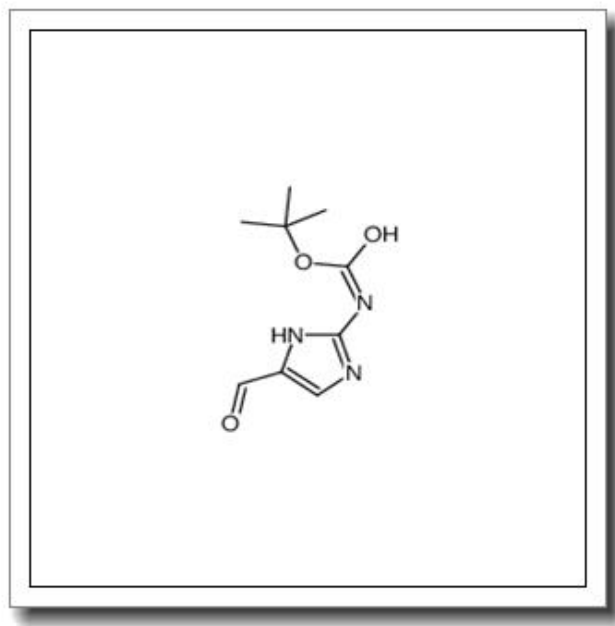


5-甲酰基-1H-咪唑-2-氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl N-(5-formyl-1H-imidazol-2-yl)carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl N-(5-formyl-1H-imidazol-2-yl)carbamate
中文名称	5-甲酰基-1H-咪唑-2-氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	917919-51-8
分子式	C ₉ H ₁₃ N ₃ O ₃
分子量	211.218
纯度	≥96%

产品说明

5-甲酰基-1H-咪唑-2-氨基甲酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲酰基-1H-咪唑-2-氨基甲酸叔丁酯 (tert-butyl N-(5-formyl-1H-imidazol-2-yl)carbamate) 是一种重要的咪唑类衍生物, CAS 号为 917919-51-8。该化合物分子式为 C₉H₁₃N₃O₃, 分子量为 211.218, 常温下为白色至类白色结晶性粉末。其结构中含有甲酰基和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 赋予其特殊的反应活性。产品纯度 ≥96%, 符合大多数合成应用的要求。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为咪唑环系的修饰衍生物, 在生物化学领域具有多重功能。其甲酰基可作为亲电反应位点参与缩合反应, 而 Boc 保护基则提供了氨基的可逆保护特性。这种双重功能使其成为构建复杂分子结构的关键中间体, 特别是在杂环化合物合成和药物分子设计中具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 常用于抗生素、抗肿瘤药物及酶抑制剂等活性分子的结构修饰。具体用途包括: 作为蛋白激酶抑制剂合成的关键中间体; 用于构建含有咪唑环的生物活性分子; 在组合化学中作为结构单元参与多样性导向合成。此外, 在材料科学领域也有潜在应用价值。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 下避光干燥储存, 长期保存应置于惰性气体环境中。开封后建议尽快使用, 避免反复冻融。使用时应在干燥惰性气氛下操作, 推荐使用手套箱或 Schlenk 技术处理。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、N,N-二甲基甲酰胺 (DMF) 等极性有机溶剂, 微溶于醇类溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间稳定性。安全数据表明, 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴适当的防护装备。避免吸入

粉尘和接触粘膜，实验应在通风良好的环境中进行。如发生意外接触，应立即用大量清水冲洗并寻求医疗帮助。废弃物处置应遵守当地化学品处理法规。