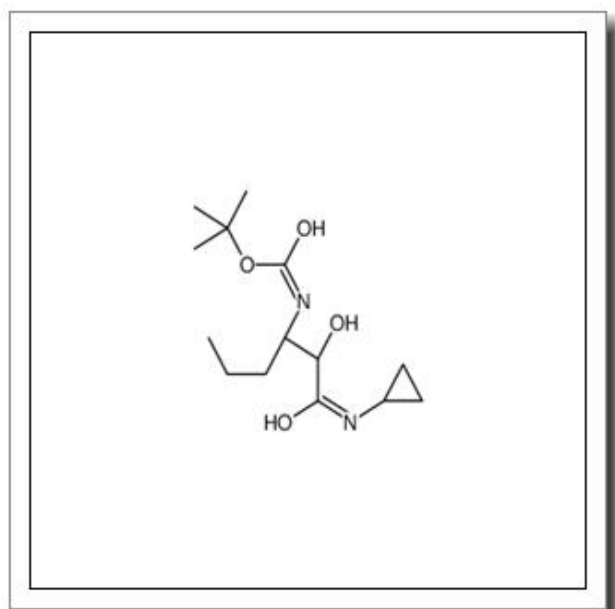


N-[(1S)-1-[2-(环丙基氨基)-1-羟基-2-氧代乙基]丁基]-氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl N-[(3S)-1-(cyclopropylamino)-2-hydroxy-1-oxohexan-3-yl]carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl N-[(3S)-1-(cyclopropylamino)-2-hydroxy-1-oxohexan-3-yl]carbamate</i>
中文名称	N-[(1S)-1-[2-(环丙基氨基)-1-羟基-2-氧代乙基]丁基]-氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	856707-39-6
分子式	C ₁₄ H ₂₆ N ₂ O ₄
分子量	286.367
纯度	≥96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl N-[(3S)-1-(cyclopropylamino)-2-hydroxy-1-oxohexan-3-yl]carbamate, 中文名称为 N-[(1S)-1-[2-(环丙基氨基)-1-羟基-2-氧代乙基]丁基]-氨基甲酸叔丁酯, CAS 号为 856707-39-6。其分子式为 C₁₄H₂₆N₂O₄, 分子量为 286.367, 纯度不低于 96%。该化合物为白色至类白色固体, 具有特定的立体构型 (S 构型), 结构中含有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团、环丙基氨基以及羟基等官能团, 使其在有机合成和药物化学中具有重要应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的手性中间体, 常用于多肽合成和药物研发领域。其 Boc 保护基团可选择性脱除, 便于后续官能团修饰。环丙基氨基和羟基的存在使其成为构建复杂分子 (如蛋白酶抑制剂或抗菌药物) 的关键结构单元。该分子在生物活性分子的设计与优化中具有广泛潜力, 尤其在调节药物代谢稳定性和生物利用度方面表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和有机合成领域, 具体包括:

- 作为手性砌块用于合成具有生物活性的肽类化合物。
- 用于构建小分子药物候选物, 尤其是靶向酶或受体的抑制剂。
- 在不对称合成中作为中间体, 参与碳-氮键或碳-氧键的形成反应。
- 适用于药物化学中的结构-活性关系 (SAR) 研究, 帮助优化先导化合物的药效学性质。

4. 储存条件与使用建议

本品需在干燥、避光条件下保存, 推荐储存温度为 2-8° C, 长期保存建议置于惰性气体 (如氮气) 环境中。开封后应避免频繁暴露于空气中, 以防吸湿或降解。使

用时需在干燥环境下操作，建议佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砷（DMSO）和甲醇，部分溶于氯仿，难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱（HPLC）检测，纯度 $\geq 96\%$ 。使用时应遵守实验室安全规范，避免吸入粉尘或接触皮肤。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。安全数据表（SDS）提供了详细的毒理学信息，显示本品可能对眼睛和皮肤有刺激性。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验条件进一步验证。