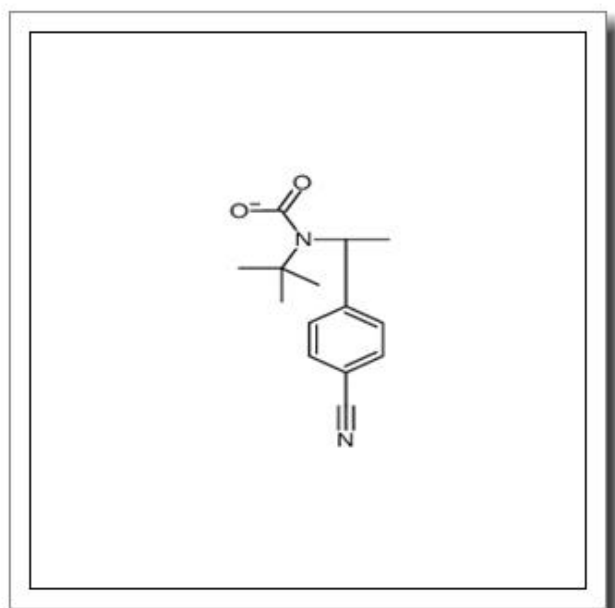


# N-tert-butyl-N-[(1S)-1-(4-cyanophenyl)ethyl]carbamate

*N-tert-butyl-N-[(1S)-1-(4-cyanophenyl)ethyl]carbamate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	N-tert-butyl-N-[(1S)-1-(4-cyanophenyl)ethyl]carbamate
中文名称	N-tert-butyl-N-[(1S)-1-(4-cyanophenyl)ethyl]carbamate
CAS 号	847729-63-9
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	245.297
纯度	≥ 96%

## 产品说明

产品名称: N-tert-butyl-N-[(1S)-1-(4-cyanophenyl)ethyl]carbamate

CAS 号: 847729-63-9

分子式: C<sub>14</sub>H<sub>17</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

分子量: 245.297

纯度: ≥96%

### 1. 产品概述与化学特性

N-tert-butyl-N-[(1S)-1-(4-cyanophenyl)ethyl]carbamate 是一种手性有机化合物, 其分子结构中包含叔丁基、氰苯基和氨基甲酸酯基团。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 具有特定的光学活性 (S 构型)。其分子量为 245.297, 化学性质稳定, 但在强酸或强碱条件下可能发生水解反应。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域常作为手性中间体或抑制剂前体, 尤其在药物研发中具有重要价值。其氰苯基结构赋予其潜在的生物活性, 可用于靶向特定酶或受体。此外, 手性中心的存在使其在不对称合成中可作为关键构建模块, 用于制备高光学纯度的药物分子。

### 3. 主要应用领域与具体用途

N-tert-butyl-N-[(1S)-1-(4-cyanophenyl)ethyl]carbamate 广泛应用于医药和有机合成领域。具体用途包括:

- 作为手性助剂或中间体, 用于合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物;
- 在不对称催化反应中作为配体或底物, 提高反应的选择性;
- 用于研究酶抑制剂或受体调节剂的构效关系。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度控制在 2-8°C。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 以避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接

触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于有机溶剂（如二氯甲烷、甲醇），难溶于水。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq$ 96%。使用前建议进行核磁共振（NMR）或质谱（MS）验证以确保结构准确性。安全信息如下：

- 避免与强氧化剂接触，以防发生剧烈反应；
- 操作时需佩戴防护手套、护目镜和实验服；
- 如不慎接触皮肤或眼睛，立即用大量清水冲洗并就医；
- 废弃物需按危险化学品规范处置。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验条件进一步优化。