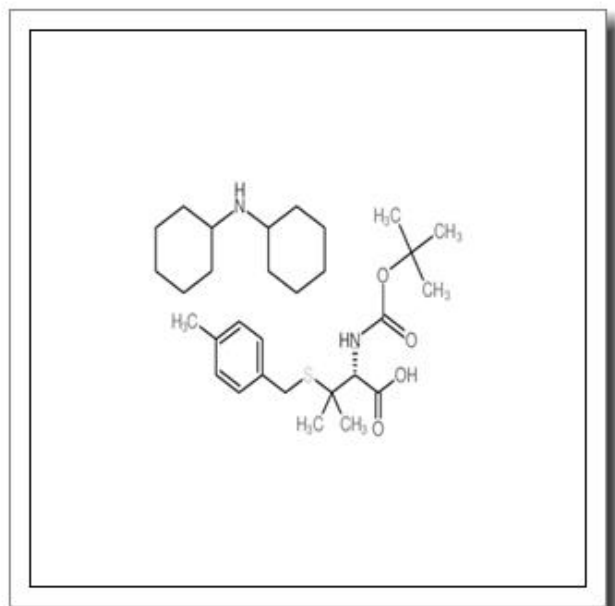


N-叔丁氧羰基-S-(4-甲基苄基)-D-青霉胺二环己基胺

N-cyclohexylcyclohexanamine, (2R)-3-methyl-3-[(4-methylphenyl)methylsulfanyl]-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-cyclohexylcyclohexanamine, (2R)-3-methyl-3-[(4-methylphenyl)methylsulfanyl]-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoic acid
中文名称	N-叔丁氧羰基-S-(4-甲基苄基)-D-青霉胺二环己基胺
CAS 号	198474-61-2
分子式	C30H50N2O4S
分子量	534.794
纯度	≥96%

产品说明

N-叔丁氧羰基-S-(4-甲基苄基)-D-青霉胺二环己基胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 N-cyclohexylcyclohexanamine, (2R)-3-methyl-3-[(4-methylphenyl)methylsulfanyl]-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoic acid, CAS 号为 198474-61-2, 分子式为 C₃₀H₅₀N₂O₄S, 分子量为 534.794。该化合物是一种手性有机硫化物, 结构中包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团、4-甲基苄基硫醚以及青霉胺骨架, 纯度 ≥96%, 常温下呈白色至类白色结晶粉末。其独特的多功能基团设计使其在不对称合成和药物修饰中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为青霉胺衍生物, 该化合物通过硫醚键和 Boc 保护基的引入, 显著增强了分子稳定性和脂溶性。其手性中心 (2R 构型) 可特异性参与酶促反应或作为手性配体, 在立体选择性合成中发挥关键作用。二环己基胺盐形式进一步提高了产物的结晶性和储存稳定性, 适用于高要求的医药中间体制备。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 3.1 医药研发——作为 β-内酰胺类抗生素修饰的前体, 或用于构建含硫手性药物分子 (如 ACE 抑制剂)。
- 3.2 不对称催化——作为金属配体的组成部分, 促进 C-S 键形成反应。
- 3.3 保护基化学——Boc 基团可在酸性条件下选择性脱除, 用于多肽固相合成中的氨基保护。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 -20℃ 至 4℃ 长期保存。使用前需恢复至室温并干燥处理 (如 P205 干燥器)。溶解性测试表明, 易溶于二氯甲烷、DMF

等有机溶剂，水溶性差。实验操作建议在惰性气体保护下进行，避免强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据：

- 5.1 危害标识——可能引起眼睛/皮肤刺激，吸入或食入有害。
- 5.2 防护措施——操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。
- 5.3 应急处理——接触皮肤后立即用肥皂水冲洗，误食需就医并携带本品 CAS 标签。

本产品仅限科研用途，不适用于食品、化妆品或直接药用。