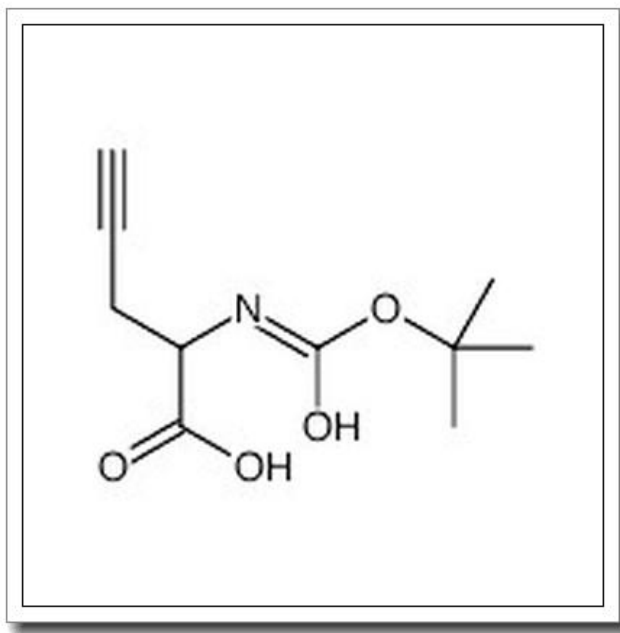


# 2-(叔丁氧基羰基)-4-戊炔酸

*2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]pent-4-ynoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]pent-4-ynoic acid
中文名称	2-(叔丁氧基羰基)-4-戊炔酸
CAS 号	61172-66-5
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>0</sub> O <sub>4</sub>
分子量	213.23
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-(叔丁氧基羰基)-4-戊炔酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-(叔丁氧基羰基)-4-戊炔酸 (化学名称: 2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]pent-4-ynoic acid) 是一种重要的有机合成中间体, CAS 号为 61172-66-5, 分子式为  $C_{10}H_{15}NO_4$ , 分子量为 213.23。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有炔烃和羧酸的双重反应活性, 同时受叔丁氧基羰基 (Boc) 保护基团修饰, 在温和条件下可选择性脱保护。其结构中包含的炔基可作为点击化学 (Click Chemistry) 的关键位点, 广泛应用于生物共轭和材料修饰领域。

#### 2. 生物化学功能与重要性

本产品 在肽类化合物合成中作为非天然氨基酸衍生物, 能够通过炔基与叠氮化合物的环加成反应 (如 CuAAC) 实现生物分子的定点标记。Boc 保护基团在酸性条件下可高效脱除, 确保其在固相肽合成 (SPPS) 中的兼容性。此外, 其羧酸基团可进一步活化形成酰胺键, 为多官能团分子的构建提供灵活设计空间。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该试剂主要用于以下领域: 一是药物研发中作为蛋白质修饰工具, 用于抗体-药物偶联物 (ADC) 的 linker 合成; 二是材料科学中制备功能化聚合物或表面涂层; 三是化学生物学研究, 如荧光探针标记或生物正交反应。具体应用中, 需注意其炔基在铜催化或应变促进条件下的反应选择性。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、干燥避光条件下密封保存, 避免与强氧化剂或酸性物质接触。使用前需恢复至室温以减少吸湿影响。溶解性测试表明, 其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性较低, 建议配制时使用极性有机溶剂辅助分散。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , MS 和 NMR 验证结构一致性。操作时需佩戴防护手套及护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。安全数据表 (SDS) 包含详细毒理学信息, 建议在通风橱中处理废弃物。

注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。