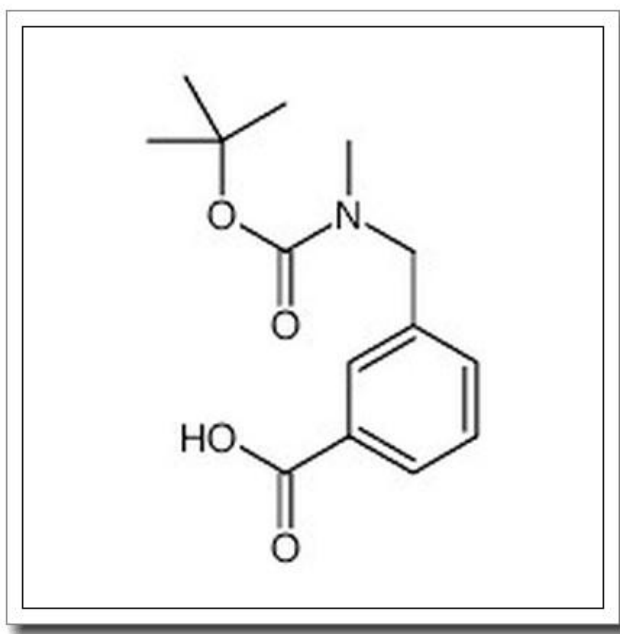


3-[[methyl-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]amino]methyl]benzoic acid

3-[[methyl-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]amino]methyl]benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[[methyl-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]amino]methyl]benzoic acid
中文名称	3-[[methyl-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]amino]methyl]benzoic acid
CAS 号	155567-87-6
分子式	C ₁₄ H ₁₉ N ₀₄
分子量	265.305
纯度	>96%

产品说明

3-[[甲基-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]氨基]甲基]苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 3-[[甲基-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]氨基]甲基]苯甲酸 (CAS 号: 155567-87-6), 分子式为 C₁₄H₁₉N₀₄, 分子量 265.305, 是一种白色至类白色结晶粉末。其结构包含苯甲酸骨架与叔丁氧羰基 (Boc) 保护的氨基甲基基团, 纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物在常温下稳定, 易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水 (pH 依赖性)。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Boc 保护的氨基酸衍生物, 该分子在肽合成中具有关键作用。其羧基可活化形成活性酯, 而 Boc 基团在酸性条件下 (如 TFA 处理) 可选择性脱除, 实现氨基的定向保护与去保护。这一特性使其成为固相肽合成 (SPPS) 和药物分子构建中的重要中间体, 尤其适用于需要正交保护策略的复杂肽链组装。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域:

- (1) 多肽药物开发: 作为非天然氨基酸砌块, 用于构建具有特定生物活性的肽类化合物;
- (2) PROTAC 分子合成: 通过羧基与靶蛋白配体连接, 参与双功能降解剂的设计;
- (3) 材料化学: 作为功能单体参与聚合物合成, 赋予材料 pH 响应性或生物相容性;
- (4) 科研试剂: 用于激酶抑制剂或 GPCR 配体的结构修饰研究。

4. 储存条件与使用建议

推荐储存于 -20° C、避光、干燥环境中, 有效期 24 个月。使用时需注意:

- (1) 溶解前平衡至室温以避免吸湿;
- (2) 在惰性气体 (如氮气) 保护下进行敏感反应;
- (3) 建议通过薄层色谱 (TLC) 或 LC-MS 监测反应进程。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS)、核磁 (^1H NMR) 及 HPLC 三重验证, 符合 ACS 级标准。安全数据如下:

- (1) 避免吸入粉尘或接触皮肤, 操作时佩戴护目镜与丁腈手套;
- (2) 如接触眼睛, 立即用大量清水冲洗并就医;
- (3) 废弃物需按有机有害物质处理规范处置。

(注: 具体安全操作请参阅随货提供的 MSDS 文件。)