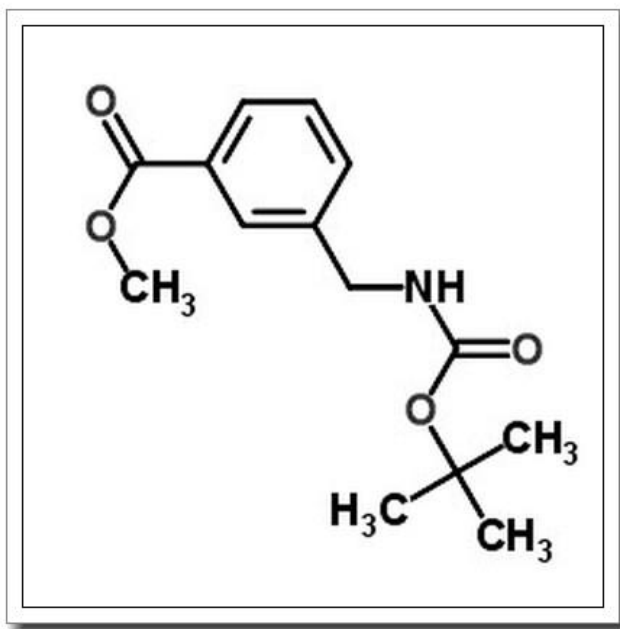


3-(((叔丁氧基羰基)氨基)甲基)苯甲酸甲酯

methyl 3-[[[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]methyl]benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-[[[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]methyl]benzoate
中文名称	3-(((叔丁氧基羰基)氨基)甲基)苯甲酸甲酯
CAS 号	180863-55-2
分子式	C ₁₄ H ₁₉ N ₀₄
分子量	265.305
纯度	>96%

产品说明

3-(((叔丁氧基羰基)氨基)甲基)苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 methyl 3-[[[2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]methyl]benzoate，是一种白色至类白色结晶粉末，分子式为 C₁₄H₁₉N₀₄，分子量 265.305，CAS 号 180863-55-2。其结构中包含叔丁氧羰基（Boc）保护基团与苯甲酸甲酯活性基团，赋予其良好的溶解性（易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇）和化学稳定性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Boc 保护的氨基酸衍生物，该化合物在肽合成中具有关键作用。Boc 基团可在酸性条件下选择性脱除，而苯甲酸甲酯部分可通过水解转化为羧酸活性位点，使其成为多肽固相合成、药物分子砌块构建的重要中间体。其分子设计兼顾了保护基的稳定性与后续修饰的灵活性，在复杂分子组装中展现出高效性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发与有机合成领域：

- 作为抗肿瘤药物、蛋白酶抑制剂等小分子药物的合成前体
- 用于构建含有苯甲酸结构的肽类化合物
- 在 PROTAC 技术中作为连接子（linker）的修饰单元
- 实验室级有机合成反应中作为氨基保护中间体

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充入惰性气体保护，有效期 24 个月。使用前需恢复至室温以避免结露。溶解推荐使用无水 DMSO（浓度 ≤50 mM），后续反应需在无水条件下进行。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、水分（KF 法）及重金属含量数据。本品对眼睛和皮肤有轻微刺激性，操作时需佩戴防护手套与护目镜。若不慎接触，立即用大量清水

冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置应遵守当地化学品管理法规，禁止直接排入下水道。

（注：本说明书基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件验证。更多技术参数可索取 COA 文件。）