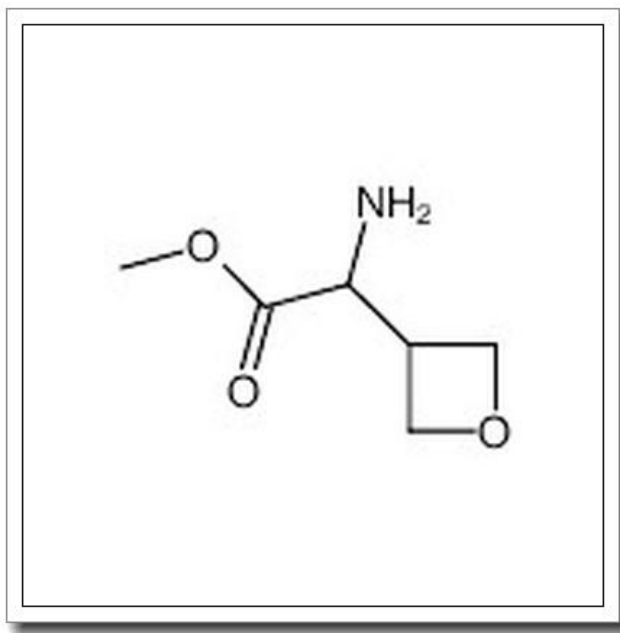


3-氧杂环丁烷基甘氨酸甲酯

Methyl 2-amino-2-(oxetan-3-yl)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-amino-2-(oxetan-3-yl)acetate
中文名称	3-氧杂环丁烷基甘氨酸甲酯
CAS 号	394653-40-8
分子式	C ₆ H ₁₁ N ₃ O ₃
分子量	145.156
纯度	>96%

产品说明

3-氧杂环丁烷基甘氨酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氧杂环丁烷基甘氨酸甲酯 (Methyl 2-amino-2-(oxetan-3-yl)acetate, CAS 号 394653-40-8) 是一种含氧杂环丁烷结构的氨基酸衍生物, 分子式为 $C_6H_{11}NO_3$, 分子量 145.156。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具氨基和酯基官能团, 具有较高的反应活性。其独特的氧杂环丁烷结构赋予分子刚性, 在药物化学中常用于构建空间受限的活性片段。

2. 生物化学功能与重要性

作为非天然氨基酸衍生物, 本品可通过酯基水解转化为羧酸, 或通过氨基参与缩合反应, 是合成肽类化合物及小分子抑制剂的重要中间体。氧杂环丁烷结构能增强代谢稳定性, 在药物设计中用于优化药代动力学性质。其在 β -内酰胺类抗生素和蛋白酶抑制剂开发中具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域:

- (1) 作为关键中间体用于合成抗肿瘤、抗感染药物;
- (2) 构建肽模拟物 (peptidomimetics), 改善天然肽的稳定性和生物利用度;
- (3) 用于共价抑制剂开发, 通过氧杂环丁烷开环反应实现靶标蛋白的不可逆结合;
- (4) 在不对称催化反应中作为手性助剂。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下密封避光保存, 干燥惰性气体保护。开封后需充氮保存, 避免吸湿分解。使用前需恢复至室温, 防止冷凝水污染。反应应在无水条件下进行, 建议使用分子筛脱水溶剂。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度, 水分含量控制在 0.5% 以下。本品对眼睛和呼吸道有刺激性,

操作时应佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗15分钟并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需结合实验方案进行风险评估。