

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

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[methyl-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]amino]benzoic acid
产品目录号	
CAS 号	263021-30-3
分子式	C13H17NO4
分子量	251.278
纯度	>96%

产品说明

4-[甲基-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]氨基]苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 4-[甲基-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]氨基]苯甲酸，分子式 $C_{13}H_{17}NO_4$ ，分子量 251.278，CAS 号 263021-30-3。其结构中包含苯甲酸骨架与叔丁氧羰基 (Boc) 保护的甲基氨基基团，赋予其良好的溶解性与反应活性。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，适用于高精度生化实验与药物合成。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为保护氨基酸衍生物，可通过 Boc 基团的选择性脱保护实现氨基官能团的定向修饰。其苯甲酸结构域可进一步衍生化，在肽类合成、酶抑制剂设计及小分子探针构建中发挥关键作用。其稳定性与可控反应性使其成为药物化学中重要的中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物研发中，本品常用于构建靶向蛋白的抑制剂分子，特别是针对含苯环结构的受体结合域。具体应用包括：1) 抗癌药物前体合成；2) 神经递质类似物制备；3) 荧光标记探针的羧基活化中间体。亦可用于材料科学中功能化聚合物的单体修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充入惰性气体保护。使用前需恢复至室温并短暂离心。溶解推荐使用 DMF 或二氯甲烷等有机溶剂，水体系需调节 pH 至碱性。实验操作应在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

批次产品均通过核磁共振 ($^1\text{H NMR}$) 与质谱 (MS) 验证结构，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：LD₅₀ (大鼠口服) > 2000 mg/kg，但可能引起眼睛与皮肤刺激。操作时需佩戴护目镜与丁腈手套，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献方法或咨询专业技术支持。