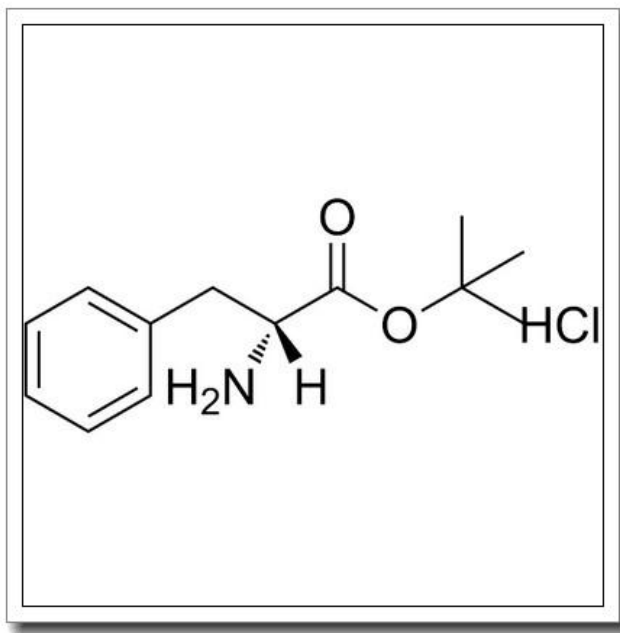


D-苯丙氨酸叔丁酯盐酸盐

tert-butyl (2R)-2-amino-3-phenylpropanoate, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl (2R)-2-amino-3-phenylpropanoate, hydrochloride
中文名称	D-苯丙氨酸叔丁酯盐酸盐
CAS 号	3403-25-6
分子式	C ₁₃ H ₂₀ ClN ₂ O ₂
分子量	257.756
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

D-苯丙氨酸叔丁酯盐酸盐 (tert-butyl (2R)-2-amino-3-phenylpropanoate, hydrochloride) 是一种手性氨基酸衍生物, 化学式为 $C_{13}H_{20}ClN_2O_2$, 分子量为 257.756。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, CAS 号为 3403-25-6, 纯度通常高于 96%。其结构中的叔丁酯基团和盐酸盐形式使其在有机合成中具有独特的溶解性和反应活性。该物质易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、乙醇), 微溶于水, 需在干燥条件下保存以避免水解。

2. 生物化学功能与重要性

作为 D-苯丙氨酸的酯化衍生物, 该化合物在肽合成和手性药物研发中具有重要作用。其叔丁酯基团可作为保护基, 在酸性条件下选择性脱除, 而盐酸盐形式提高了稳定性和结晶性。在生物化学研究中, 它常用于构建非天然氨基酸片段或作为酶底物类似物, 用于研究酶催化机制和立体选择性。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 医药中间体: 用于合成手性药物 (如抗病毒剂、蛋白酶抑制剂) 的关键砌块。
- 肽化学: 作为固相肽合成 (SPPS) 中 D-型氨基酸的引入单元, 尤其适用于需要叔丁酯保护策略的合成路线。
- 不对称催化: 作为配体或底物参与不对称氢化反应, 构建光学活性化合物。
- 生化研究: 用于模拟天然氨基酸代谢途径或研究转运蛋白特异性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 干燥避光条件下储存, 长期保存需充惰性气体 (如氮气) 密封。使用前需平衡至室温并避免吸湿。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试推荐先用少量 DMSO 或甲醇助溶, 再稀释至所需溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 其急性

毒性较低（LD50 未明确），但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。意外接触时需用大量清水冲洗，并就医处理。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。运输分类为非危险品，但建议使用防潮包装。

注：具体实验方案需结合目标反应体系优化，建议参考文献或进行小试验证。