

methyl (2S)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-2-(phenylmethoxycarbonylamino)propanoate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl (2S)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-2-(phenylmethoxycarbonylamino)propanoate
产品目录号	
CAS 号	58457-98-0
分子式	C17H24N2O6
分子量	352.382
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为甲基(2S)-3-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基氨基]-2-(苯甲氧羰基氨基)丙酸酯，分子式 C₁₇H₂₄N₂O₆，分子量 352.382，CAS 号 58457-98-0。其结构中同时含有叔丁氧羰基 (Boc) 和苄氧羰基 (Cbz) 保护基团，属于氨基酸衍生物类化合物。该产品纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%，具有明确的手性中心 (2S 构型)，在有机溶剂如甲醇、二氯甲烷中溶解性良好，但难溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为多肽合成中的关键中间体，本品通过 Boc 和 Cbz 双保护策略可实现氨基的选择性脱保护，广泛应用于固相与液相肽链组装。其分子中的酯基 (甲酯) 特性便于后续羧基活化或转化，在构建含有非天然氨基酸的肽类化合物时尤为重要。该结构单元对蛋白酶稳定性高，常用于药物研发中肽模拟物的设计。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域：

- 医药研发：作为 HIV 蛋白酶抑制剂、抗肿瘤肽类药物的合成砌块
- 生物探针：用于标记肽链的荧光或同位素修饰前体
- 材料科学：制备自组装肽基纳米材料的功能化单体

典型操作包括：在酸性条件下选择性脱除 Boc 保护基 (如三氟乙酸处理)，保留 Cbz 基团进行后续偶联反应；或通过氢解反应去除 Cbz 基团。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于密闭容器中，置于 -20℃ 干燥避光环境，惰性气体 (如氩气) 保护可延长稳定性。开封后需在干燥箱中操作，避免吸湿。使用前建议室温平衡 30 分钟，称量后立即密封。溶解时优先选用无水级有机溶剂，反应体系需严格除水。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构，批次间保留时间偏差 ≤0.5%

(HPLC 检测)。安全数据表明:

- 避免吸入粉尘或接触皮肤, 操作时需佩戴护目镜与丁腈手套
- 急性毒性 (LD50 大鼠经口): >2000 mg/kg
- 废弃物处理应遵守有机危险废物处置规范

如遇意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。完整安全信息参见随货提供的 MSDS 文件。