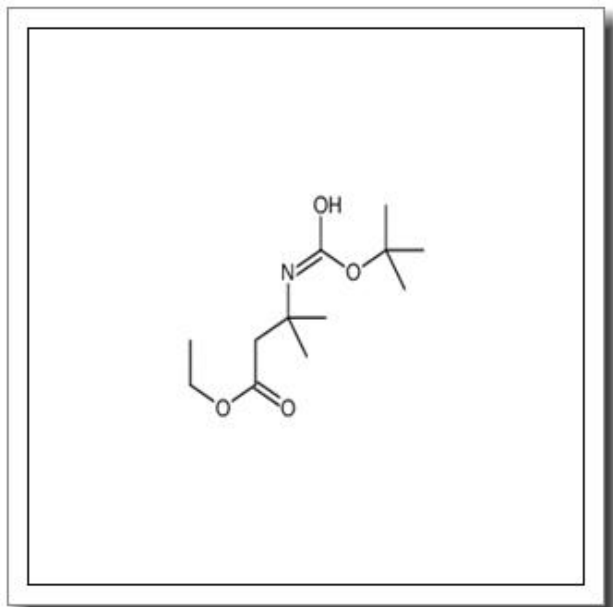


3-(叔丁氧基羰基氨基)-3-甲基丁酸乙酯

Ethyl 3-((tert-butoxycarbonyl)amino)-3-methylbutanoate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | Ethyl 3-((tert-butoxycarbonyl)amino)-3-methylbutanoate |
| 中文名称 | 3-(叔丁氧基羰基氨基)-3-甲基丁酸乙酯 |
| CAS 号 | 130985-42-1 |
| 分子式 | C ₁₂ H ₂₃ N ₀₄ |
| 分子量 | 245.315 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

3-(叔丁氧基羰基氨基)-3-甲基丁酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Ethyl 3-((tert-butoxycarbonyl)amino)-3-methylbutanoate，是一种含叔丁氧羰基（Boc）保护基的氨基酸衍生物。其分子式为 C₁₂H₂₃N₀₄，分子量 245.315，CAS 号为 130985-42-1。外观通常为无色至淡黄色液体或低熔点固体，纯度 ≥96%。该化合物具有酯基和 Boc 保护氨基的双重官能团，在有机溶剂（如二氯甲烷、乙酸乙酯）中溶解性良好，但对水分敏感，需避免强酸强碱条件。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Boc 保护的 β-氨基酸酯，该化合物在肽合成中扮演关键角色。Boc 基团可通过温和酸解（如三氟乙酸）选择性脱除，而酯基可进一步水解为羧酸或参与缩合反应。其结构中的季碳中心赋予分子空间位阻效应，适用于构建非天然氨基酸或手性药物中间体，在立体选择性合成中具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域：

- (1) 多肽固相合成中作为 Boc-β-氨基酸前体；
- (2) 构建蛋白酶抑制剂或抗菌肽的修饰单元；
- (3) 合成手性催化剂或功能材料单体；
- (4) 用于神经科学研究中模拟神经递质结构的化合物开发。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃至 4℃的干燥惰性环境（推荐充氮密封），避免光照与湿度。开封后需立即使用或重新密封。使用前建议室温平衡以降低吸湿风险，反应体系中需严格除水。溶解时优先选用无水级溶剂，并配合分子筛脱水处理。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 双重验证纯度，批次间偏差 ≤1%。该物质对眼睛和皮肤有刺激

性，操作时需佩戴护目镜、防化手套，并在通风橱中进行。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。）