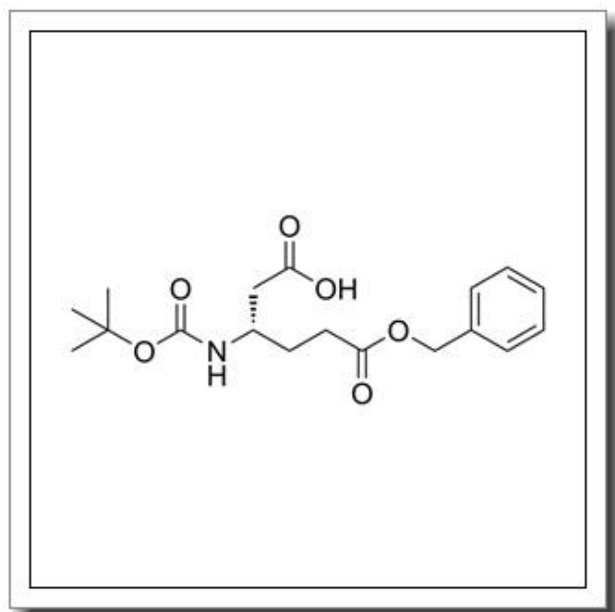


# Boc-L-beta-高谷氨酸 6-苄酯

*3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-6-oxo-6-phenylmethoxyhexanoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-6-oxo-6-phenylmethoxyhexanoic acid
中文名称	Boc-L-beta-高谷氨酸 6-苄酯
CAS 号	218943-30-7
分子式	C <sub>18</sub> H <sub>25</sub> N <sub>0</sub> O <sub>6</sub>
分子量	351.394
纯度	≥96%

## 产品说明

3-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基氨基]-6-氧代-6-苯甲氧基己酸 (Boc-L-beta-高谷氨酸 6-苄酯) 产品说明书

### 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 3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-6-oxo-6-phenylmethoxyhexanoic acid，分子式 C<sub>18</sub>H<sub>25</sub>N<sub>1</sub>O<sub>6</sub>，分子量 351.394，CAS 号 218943-30-7。其结构包含 Boc（叔丁氧羰基）保护基团及苄酯修饰，纯度 ≥96%（HPLC 测定），易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水。该化合物是 L-高谷氨酸的衍生物，具有手性中心，需避光保存以防消旋化。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为保护性氨基酸衍生物，Boc 基团可选择性脱除而不影响苄酯结构，使其成为多肽固相合成中的关键中间体。其 β-位延伸的碳链特性可模拟天然谷氨酸的构象，在神经递质类似物开发及酶底物研究中具有独特价值。苄酯基团提供羧基保护，适用于 Fmoc/t-Boc 策略的逐步缩合反应。

### 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) 作为非天然氨基酸砌块，用于合成靶向 GPCR 受体的多肽药物；
- (2) 构建蛋白酶抑制剂的核心骨架，如 HIV-1 蛋白酶抑制剂的侧链修饰；
- (3) 神经科学研究中用于谷氨酸能信号通路探针的制备；
- (4) 手性辅助剂的不对称合成。建议使用量 0.1-5 当量，反应条件需控制 pH 7-9 以避免 Boc 基团过早裂解。

### 4. 储存条件与使用建议

储存于密封容器中，-20℃干燥避光保存，有效期 24 个月。开封后建议充氮保护，剩余物料需重新密封。使用前需恢复至室温平衡 1 小时，称量环境湿度应 <40%。溶解推荐使用无水 DMF 或二氯甲烷，避免与强氧化剂、强酸共存。

## 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 和质谱进行批次质检, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服) >2000 mg/kg, 操作时需佩戴护目镜及丁腈手套。若接触皮肤, 立即用大量肥皂水冲洗。废弃物处置应遵守当地危险化学品法规。

本产品仅供科研用途, 不适用于诊断或治疗。具体应用需结合实验方案优化条件。