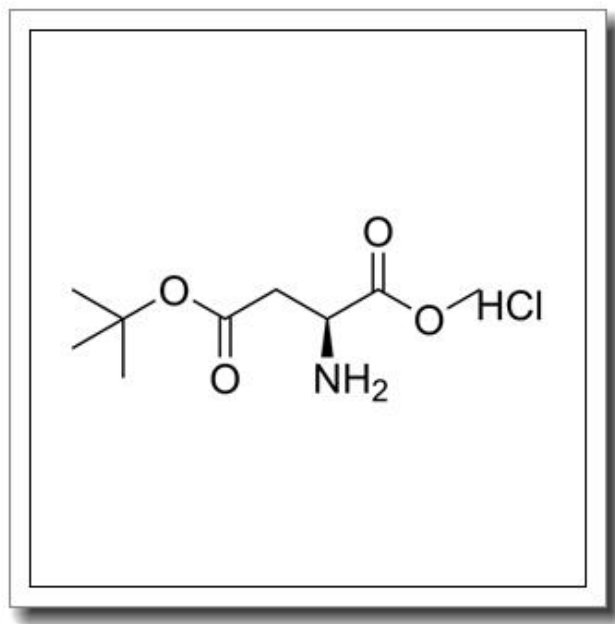


L-天冬氨酸-4-叔丁基-1-甲酯 盐酸盐

4-O-tert-butyl 1-O-methyl (2S)-2-aminobutanedioate, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-O-tert-butyl 1-O-methyl (2S)-2-aminobutanedioate, hydrochloride
中文名称	L-天冬氨酸-4-叔丁基-1-甲酯 盐酸盐
CAS 号	2673-19-0
分子式	C ₉ H ₁₈ N ₁ O ₄
分子量	239.697
纯度	≥96%

产品说明

4-0-叔丁基-1-0-甲基-L-天冬氨酸盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-0-tert-butyl 1-0-methyl (2S)-2-aminobutanedioate, hydrochloride, 中文命名为 L-天冬氨酸-4-叔丁基-1-甲酯盐酸盐, CAS 号为 2673-19-0。其分子式为 C₉H₁₈ClN₀₄, 分子量为 239.697, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 是 L-天冬氨酸的衍生物, 通过叔丁基和甲酯基团对羧酸位点进行保护, 同时以盐酸盐形式增强其稳定性。其结构中的手性中心 (2S 构型) 确保了光学纯度, 适用于对立体化学有严格要求的合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为保护型氨基酸衍生物, 本产品在三肽合成中具有关键作用。叔丁基和甲酯保护基可选择性脱除, 便于后续定向偶联反应。其盐酸盐形式提高了溶解性, 尤其适用于固相肽合成 (SPPS) 和溶液相合成。此外, 该化合物可作为手性砌块用于非天然氨基酸或药物活性分子的构建, 在调节肽链构象和增强代谢稳定性方面表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和生物化学领域:

- (1) 多肽药物合成中作为中间体, 特别是需要天冬氨酸残基保护的场景;
- (2) 蛋白酶抑制剂或受体调节剂类药物的结构修饰;
- (3) 生物标记物合成中的手性模板;
- (4) 学术研究中氨基酸保护/脱保护机制的探究。

4. 储存条件与使用建议

储存于 2-8℃ 干燥环境中, 避免光照和吸湿。开封后建议充氮保存, 以延长稳定性。使用前需平衡至室温, 防止冷凝水引入。溶解时可选用无水 DMF 或二氯甲烷等有机溶剂, 若需水相反应, 建议先脱盐处理。操作时需通风橱中进行, 避免直接接触。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。该产品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。安全数据表（SDS）包含详细毒理学数据（LD50 等信息），可应要求提供。

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床或食品领域。