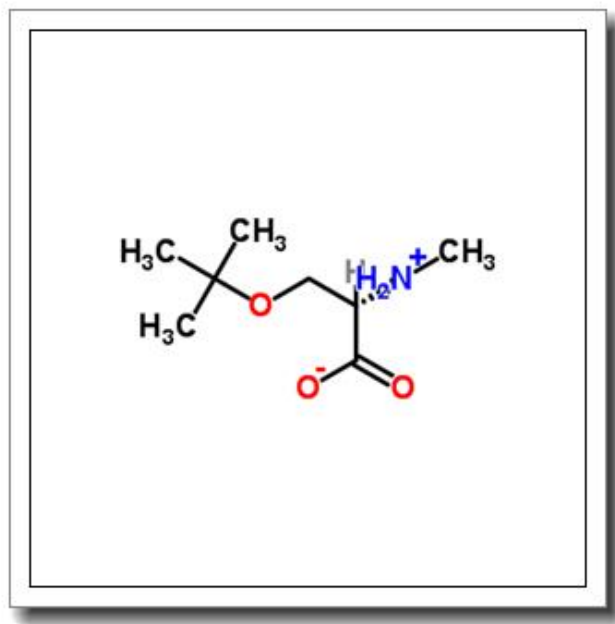


O-叔丁基-N-甲基-L-丝氨酸

(2S)-2-(methylamino)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxy]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-2-(methylamino)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxy]propanoic acid
中文名称	O-叔丁基-N-甲基-L-丝氨酸
CAS 号	197632-83-0
分子式	C ₈ H ₁₇ N ₀₃
分子量	175.225
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S)-2-(甲基氨基)-3-[(2-甲基丙-2-基)氧基]丙酸 (O-叔丁基-N-甲基-L-丝氨酸) 是一种非天然氨基酸衍生物, CAS 号为 197632-83-0, 分子式为 C₈H₁₇N₀₃, 分子量为 175.225。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 具有手性中心 (S 构型), 其结构特征为丝氨酸的羟基被叔丁氧基取代, 同时氨基氮原子甲基化。其疏水性叔丁氧基团和极性羧酸基团赋予分子独特的双亲性质, 在有机溶剂 (如 DMSO、甲醇) 中部分溶解, 水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为丝氨酸的结构类似物, 本产品可通过竞争性抑制干扰丝氨酸依赖性代谢途径, 如单碳单元转移和磷脂合成。其叔丁氧基团提供空间位阻效应, 可特异性阻断某些酶的活性位点, 常用于研究蛋白质-配体相互作用机制。在肽类药物设计中, 该衍生物能增强肽链的代谢稳定性并调节膜穿透性, 是构效关系研究的重要工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物研发领域, 本品主要用于: 1) 作为蛋白酶抑制剂的关键结构单元; 2) 构建稳定化肽类药物的修饰氨基酸; 3) 放射性标记前体化合物的合成中间体。学术研究中常用于: 1) 酶催化机制研究; 2) 膜转运蛋白底物特异性分析; 3) 代谢组学标记实验。工业应用涉及手性催化剂配体的制备。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于-20℃干燥环境中, 避免反复冻融。开启后建议充入惰性气体保护, 有效期 24 个月。使用前需室温平衡 30 分钟, 称量应在干燥环境下快速完成。工作溶液建议现配现用, 溶剂首选无水 DMSO (浓度 ≤50mM), 若需水溶液应加入适量碱助溶。实验废弃物应按有机胺类化合物处理规范处置。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC (C18 柱, 214nm 检测) 验证纯度, 批间差异 <2%。核磁共振 (1H/13C NMR) 和质谱 (ESI-MS) 确认结构。安全数据: 急性毒性 (大鼠口服 LD₅₀) >

2000mg/kg, 皮肤刺激性类别 3。操作时需佩戴护目镜与丁腈手套, 避免吸入粉尘。如接触眼睛, 立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。储存区域应远离氧化剂和强酸。