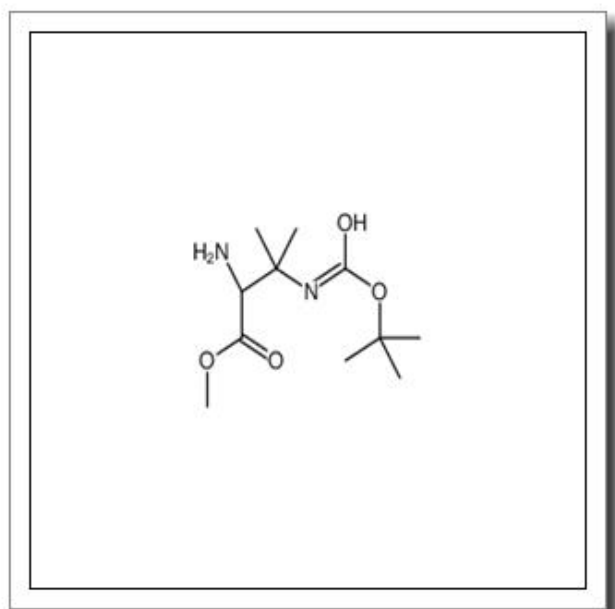


(S)-2-氨基-3-叔丁氧羰基氨基-3-甲基 丁酸甲酯

methyl (2S)-2-amino-3-methyl-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl (2S)-2-amino-3-methyl-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoate
中文名称	(S)-2-氨基-3-叔丁氧羰基氨基-3-甲基丁酸甲酯
CAS 号	1093192-07-4
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₄
分子量	246.303
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(S)-2-氨基-3-叔丁氧羰基氨基-3-甲基丁酸甲酯, 化学名称 methyl (2S)-2-amino-3-methyl-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoate, CAS 号 1093192-07-4。其分子式为 C₁₁H₂₂N₂O₄, 分子量为 246.303, 纯度 ≥96%。该化合物是一种手性氨基酸衍生物, 具有特定的立体构型(S 构型), 结构中含有叔丁氧羰基(Boc)保护基团和甲酯基团, 使其在有机合成中表现出优异的稳定性和反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为氨基酸保护衍生物, 本产品在多肽合成和药物化学中具有重要作用。Boc 基团可有效保护氨基, 避免其在缩合反应中发生副反应, 同时可通过酸性条件温和脱除。其手性中心为药物研发中构效关系研究提供了关键中间体, 尤其在 β-氨基酸类化合物合成中不可或缺。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于多肽合成、蛋白酶抑制剂开发及非天然氨基酸制备。具体用途包括: 作为 HIV 蛋白酶抑制剂合成中间体; 用于构建含有 β-氨基酸结构的生物活性分子; 在不对称合成中作为手性模板。其甲酯基团可通过水解转化为羧酸, 进一步扩展应用范围。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 干燥避光环境中保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛(如氮气)下操作, 防止吸湿降解。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 水溶性较差。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 ≥96%, 严格检测旋光纯度([α]_D 值)。安全数据表明该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套和护目镜。MSDS 显示其

不属于剧毒物质，但仍需在通风橱中处理。废弃物处置需符合有机化学品处理规范。

本产品作为高端医药中间体，其质量标准和储存要求均符合 GMP 相关规范，适用于临床前研究及工业化生产需求。