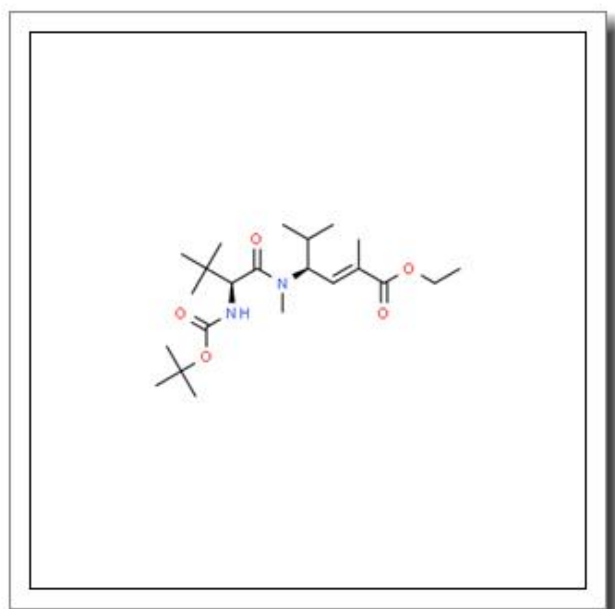


(S,E)-4-((S)-2-((叔丁氧基羰基)氨基)-N,3,3-三甲基丁酰胺基)-2

2-Hexenoic acid, 4-[[(2S)-2-[[(1,1-dimethylethoxy) carbonyl] amino]-3,3-dimethyl-1-oxobutyl] methylamino]-2,5-dimethyl-, ethyl ester, (2E,4S)-



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Hexenoic acid, 4-[[(2S)-2-[[(1,1-dimethylethoxy) carbonyl] amino]-3,3-dimethyl-1-oxobutyl] methylamino]-2,5-dimethyl-, ethyl ester, (2E,4S)-
中文名称	(S,E)-4-((S)-2-((叔丁氧基羰基)氨基)-N,3,3-三甲基丁酰胺基)-2
CAS 号	187345-37-5
分子式	C ₂₂ H ₄₀ N ₂ O ₅
分子量	412.56
纯度	≥96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(S, E)-4-((S)-2-((叔丁氧基羰基)氨基)-N, 3, 3-三甲基丁酰胺基)-2-己烯酸乙酯, 化学名称 2-Hexenoic acid, 4-[[[(2S)-2-[[[(1, 1-dimethylethoxy) carbonyl] amino]-3, 3-dimethyl-1-oxobutyl] methylamino]-2, 5-dimethyl-, ethyl ester, (2E, 4S)-, CAS 号为 187345-37-5。其分子式为 C₂₂H₄₀N₂O₅, 分子量为 412.56, 纯度 ≥96%。该化合物是一种具有特定立体构型的有机酸酯, 结构中包含叔丁氧基羰基(Boc)保护基团和酰胺键, 适用于精细有机合成及生物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要用于肽类和多肽类似物的合成, 尤其是作为中间体参与复杂分子的构建。其 Boc 保护基团可选择性脱除, 便于后续官能团修饰。此外, 其特定的立体构型(E 构型双键和 S 构型手性中心)使其在药物研发中具有潜在应用价值, 可用于研究酶抑制剂或受体配体的结构-活性关系。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发、有机合成及生物化学研究领域。具体用途包括:

- 作为手性合成子用于构建具有生物活性的肽类化合物。
- 用于多肽固相合成(SPPS)中的中间体, 尤其适用于需要 Boc 保护策略的合成路线。
- 在药物化学中作为结构修饰的前体, 探索新型药物候选分子。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于-20° C 或更低温度的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体(如氮气)以延长稳定性。使用时应在干燥惰性气氛下操作, 避免与强酸、强碱或氧化剂接触。溶解推荐使用二甲基亚砜(DMSO)或二氯甲烷等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并提供 COA (质量分析证书)。安全信息如下：

- 可能对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。
- 若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃处理需符合当地化学品管理法规。

本说明基于现有科学数据编制，具体应用需结合实验条件进一步优化。