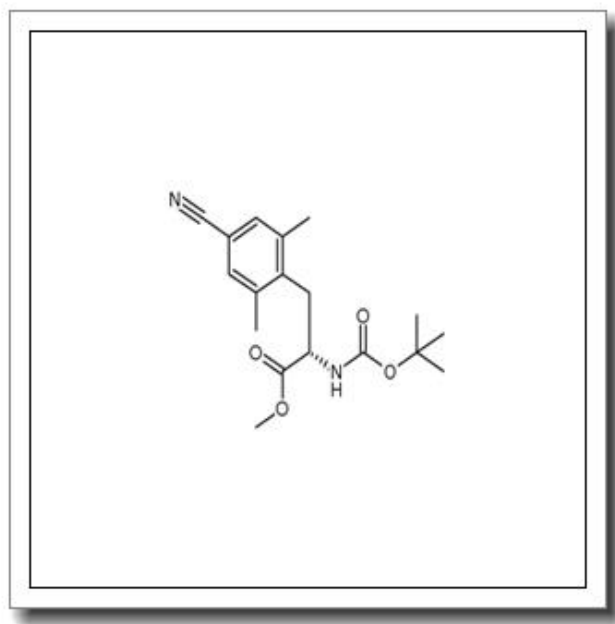


产品_659

(S)-2-*tert*-butoxycarbonylamino-3-(4-cyano-2,6-dimethyl-phenyl)-propionic acid methyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-2- <i>tert</i> -butoxycarbonylamino-3-(4-cyano-2,6-dimethyl-phenyl)-propionic acid methyl ester
中文名称	产品_659
CAS 号	1227311-10-5
分子式	C ₁₈ H ₂₄ N ₂ O ₄
分子量	332.394
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-2-tert-butoxycarbonylamino-3-(4-cyano-2,6-dimethyl-phenyl)-propionic acid methyl ester (产品_659) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 1227311-10-5, 分子式为 C₁₈H₂₄N₂O₄, 分子量为 332.394。该化合物属于氨基酸衍生物, 具有手性中心 (S 构型), 其结构中含有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基、氰基苯基团以及甲酯基团。产品纯度 ≥96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO)、甲醇等, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为氨基酸衍生物, 产品_659 在肽类合成和药物研发中具有重要作用。Boc 保护基可选择性脱除, 使其成为多肽固相合成中的关键中间体。氰基苯基团的引入增强了化合物的疏水性和电子特性, 可能影响其与生物靶标的相互作用。该结构特征使其在蛋白酶抑制剂、受体调节剂等药物分子设计中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

产品_659 主要用于医药研发领域, 具体包括: 1) 作为手性砌块用于合成具有生物活性的肽类化合物; 2) 用于构建小分子药物库, 特别是针对神经系统疾病和代谢性疾病的候选药物; 3) 在不对称合成中作为中间体, 参与碳-碳键或碳-氮键的形成反应; 4) 作为荧光标记或探针分子的前体, 用于生物成像研究。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品_659 密封保存于 -20° C 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。使用时需在干燥环境下操作, 推荐使用手套箱或通风橱。溶解时可先尝试少量 DMSO 或甲醇, 必要时加热至 40-50° C 促进溶解。长期储存建议定期检测纯度 (如 HPLC)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保结构和纯度符合标准。安全注意事项: 1) 避免吸入粉尘或接触皮肤, 操作时需佩戴防护装备; 2) 远离强氧化

剂和强酸强碱；3) 废弃物应按照有机化学品处理规范处置；4) 如意外接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。提供材料安全数据表（MSDS）备查，详细毒理学数据可进一步咨询生产商。