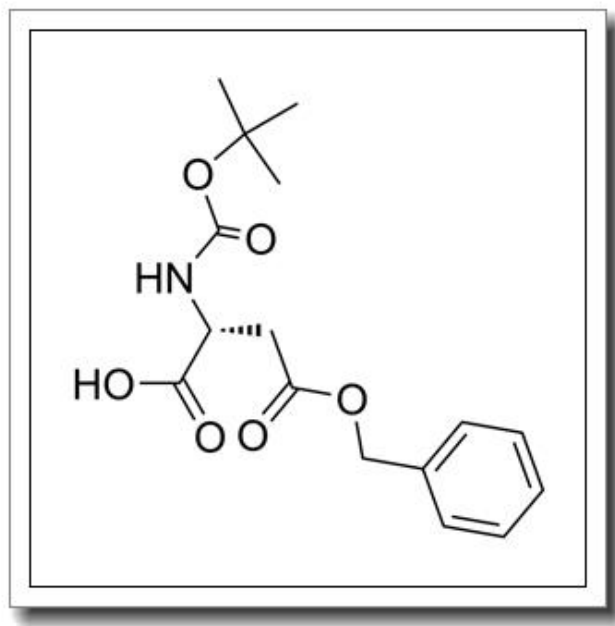


叔丁氧羰基-D-天冬氨酸 4-苄酯

N-Alpha-*t*-Boc-*D*-aspartic acid beta-benzyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-Alpha- <i>t</i> -Boc- <i>D</i> -aspartic acid beta-benzyl ester
中文名称	叔丁氧羰基-D-天冬氨酸 4-苄酯
CAS 号	51186-58-4
分子式	C ₁₆ H ₂₁ N ₀₆
分子量	323.341
纯度	≥96%

产品说明

N-Alpha-t-Boc-D-aspartic acid beta-benzyl ester 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

N-Alpha-t-Boc-D-aspartic acid beta-benzyl ester (中文名: 叔丁氧羰基-D-天冬氨酸 4-苄酯) 是一种重要的手性氨基酸衍生物, CAS 号为 51186-58-4, 分子式为 $C_{16}H_{21}NO_6$, 分子量 323.341。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有明确的立体构型 (D-构型), 其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 和苄酯 (Bz1) 基团为典型保护基团, 赋予其良好的化学选择性和反应可控性。

2. 生物化学功能与重要性

作为天冬氨酸的修饰衍生物, 本产品在肽合成中发挥关键作用。Boc 基团可选择性保护 α -氨基, 而苄酯基团保护 β -羧基, 使其在多肽固相合成或液相合成中实现定向偶联。其 D-构型特性为合成非天然肽类及手性药物提供了重要中间体, 尤其在抗肿瘤肽、酶抑制剂和神经活性肽的研发中具有不可替代的价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、生物化学及有机合成领域。具体用途包括: 1) 作为关键中间体用于合成 D-构型多肽药物; 2) 用于构建天冬氨酸衍生物库, 支持药物高通量筛选; 3) 在不对称合成中作为手性源, 制备光学活性化合物; 4) 作为保护氨基酸用于复杂肽链的片段缩合。典型应用案例包括抗 HIV 蛋白酶抑制剂和抗菌肽的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 干燥避光条件下长期储存, 短期使用可置于 $2-8^{\circ}C$ 环境。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 避免反复冻融。使用前需恢复至室温并干燥处理 (如 P205 干燥器), 溶剂宜选用无水 DMF 或二氯甲烷。注意苄酯基团对氢解敏感, 需避免接触钨碳等氢化条件。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据: 1) 避免

吸入或皮肤接触，操作时需佩戴防护手套及护目镜；2) 遇强酸强碱易分解，应在通风橱中处理；3) 废弃物需按危险化学品规范处置。MSDS 资料显示其急性毒性较低 ($LD_{50} > 2000$ mg/kg, 大鼠口服)，但仍需遵循实验室安全规程。

注：本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需根据实验设计优化反应条件。