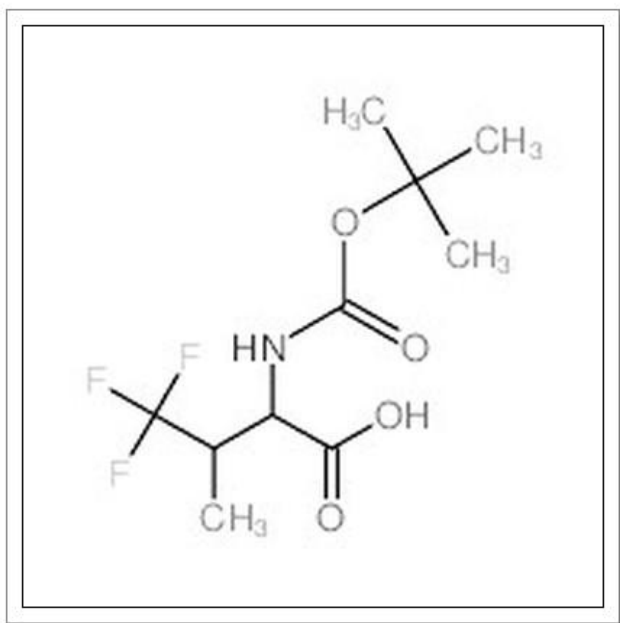


2-叔丁氧基羰基氨基-4,4,4-三氟-3-甲基-丁酸

4, 4, 4-trifluoro-3-methyl-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4, 4, 4-trifluoro-3-methyl-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoic acid
中文名称	2-叔丁氧基羰基氨基-4, 4, 4-三氟-3-甲基-丁酸
CAS 号	409333-54-6
分子式	C ₁₀ H ₁₆ F ₃ N ₀₄
分子量	271. 234
纯度	>96%

产品说明

2-叔丁氧基羰基氨基-4,4,4-三氟-3-甲基-丁酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 4,4,4-trifluoro-3-methyl-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]butanoic acid, CAS 号 409333-54-6, 分子式 C₁₀H₁₆F₃N₀₄, 分子量 271.234。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%。该化合物含三氟甲基及叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 具有显著的疏水性和空间位阻效应, 在酸性条件下易脱保护生成活性氨基。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟氨基酸衍生物, 其结构中的三氟甲基可显著增强代谢稳定性, 同时 Boc 基团提供选择性脱保护特性。这类化合物在肽类药物修饰中能改善生物利用度, 并作为蛋白酶抑制剂的关键中间体。三氟甲基的强电负性可调控分子电子分布, 影响靶标蛋白结合活性。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为含氟非天然氨基酸前体, 用于抗肿瘤、抗病毒肽类药物的结构优化;
- 3.2 农药化学: 合成具有高选择性的含氟农药活性分子;
- 3.3 材料科学: 制备含氟高分子材料的单体组分;
- 3.4 生化研究: 作为 ¹⁹F-NMR 探针或酶抑制剂研究的工具化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃干燥避光环境, 开封后需充惰性气体保护。建议在通风橱中操作, 溶解时可选用 DMF 或二氯甲烷等有机溶剂。Boc 基团在强酸 (如 TFA) 条件下易脱除, 需根据反应体系控制 pH 值。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度>96%, 水分含量<0.5%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。本品对眼

睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴护目镜及防尘口罩。若不慎接触皮肤，应立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需进一步验证其安全性和有效性。