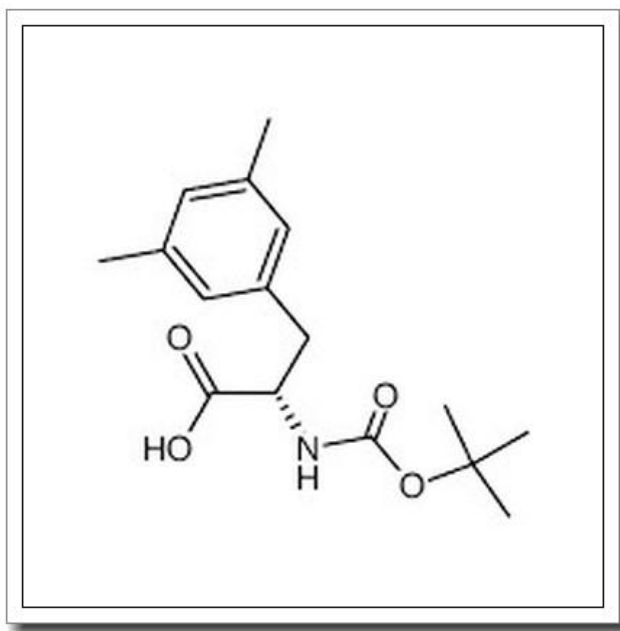


(S)-2-((叔-丁氧羰基)氨基)-3-(3,5-二甲基苯基)丙酸

Na-tert-butylloxycarbonyl-3',5'-dimethyl-L-phenylalanine



产品基本信息

属性	值
化学名称	Na-tert-butylloxycarbonyl-3',5'-dimethyl-L-phenylalanine
中文名称	(S)-2-((叔-丁氧羰基)氨基)-3-(3,5-二甲基苯基)丙酸
CAS 号	849440-33-1
分子式	C ₁₆ H ₂₃ N ₀₄
分子量	293.358
纯度	>96%

产品说明

N α -tert-butylloxycarbonyl-3',5'-dimethyl-L-phenylalanine 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 N α -叔丁氧羰基-3',5'-二甲基-L-苯丙氨酸, CAS 号为 849440-33-1, 分子式 C₁₆H₂₃N₀₄, 分子量 293.358, 是一种手性氨基酸衍生物。其结构特征为苯环 3,5 位双甲基取代, α -氨基由叔丁氧羰基 (Boc) 保护, 羧基处于游离状态。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$, 具有典型氨基酸的两性电解质特性, 易溶于有机溶剂如 DMSO、DMF, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Boc 保护的非天然氨基酸, 该分子在肽合成中具有关键作用: Boc 基团可选择性脱保护而不影响侧链结构, 3,5-二甲基苯基赋予肽链疏水性和空间位阻效应。其手性中心 (L-构型) 确保与生物系统的立体相容性, 常用于构建具有特定构象的肽类抑制剂或受体配体, 在调控蛋白质-蛋白质相互作用方面具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- (1) 多肽药物开发: 作为结构单元用于合成靶向 GPCRs、离子通道的修饰肽
- (2) PROTAC 分子构建: 通过羧基与 E3 连接酶配体偶联, 设计双功能降解剂
- (3) 材料科学: 制备自组装肽基纳米材料的疏水核心模块
- (4) 科研工具: 用于研究芳香族氨基酸簇在蛋白质折叠中的作用机制

4. 储存条件与使用建议

储存于密封容器中, -20°C 干燥避光保存, 保质期 24 个月。使用前需平衡至室温并通氮气保护以避免吸湿。建议在碱性缓冲体系 (pH 8-9) 中进行羧基活化, 偶联反应推荐使用 HOBt/DIC 缩合系统。Boc 脱保护需采用三氟乙酸/二氯甲烷 (1:1) 体系, 反应时间控制在 30-60 分钟。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度 ($\geq 96\%$)、旋光度 ($[\alpha]_{\text{D}25}$)、水分 (Karl Fischer 法 $< 0.5\%$) 等数据。本品属于刺激性化学品, 操作时需佩戴护目镜及防尘

口罩，避免吸入或皮肤接触。如不慎接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理法规。

（注：本说明书基于当前研究数据编制，具体应用需根据实验体系优化条件。）