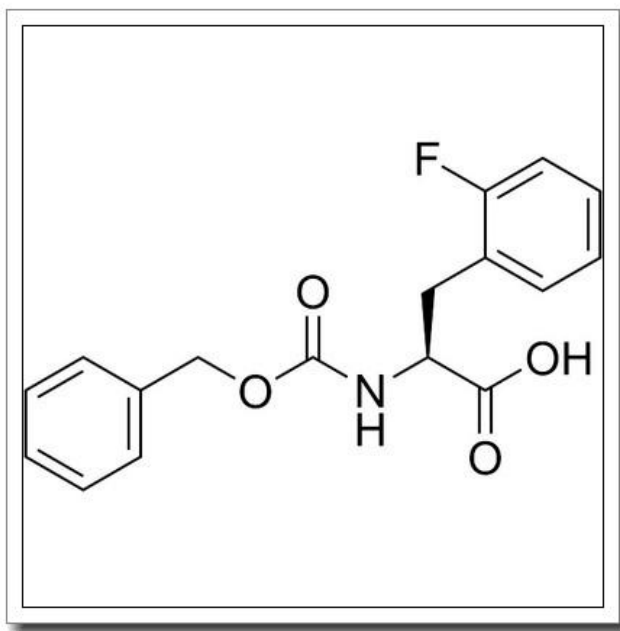


(S)-2-(((苄氧基)羰基)氨基)-3-(2-氟苯基)丙酸

(2S)-3-(2-fluorophenyl)-2-(phenylmethoxycarbonylamino)propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-3-(2-fluorophenyl)-2-(phenylmethoxycarbonylamino)propanoic acid
中文名称	(S)-2-(((苄氧基)羰基)氨基)-3-(2-氟苯基)丙酸
CAS 号	127862-88-8
分子式	C ₁₇ H ₁₆ FN ₀₄
分子量	317.312
纯度	>96%

产品说明

(2S)-3-(2-fluorophenyl)-2-(phenylmethoxycarbonylamino)propanoic acid
产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(2S)-3-(2-fluorophenyl)-2-(phenylmethoxycarbonylamino)propanoic acid，中文名称为(S)-2-(((苄氧基)羰基)氨基)-3-(2-氟苯基)丙酸，CAS 号 127862-88-8。其分子式为 C₁₇H₁₆FN₀₄，分子量 317.312，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物属于手性氨基酸衍生物，结构中含氟苯基和苄氧羰基保护基团，具有明确的立体构型（S 构型），在极性有机溶剂如甲醇、二甲基亚砷中易溶，水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯丙氨酸的氟化衍生物，本产品通过氟原子的引入增强其代谢稳定性和生物膜穿透能力。苄氧羰基（Cbz）保护基团可选择性脱除，使其成为多肽合成中重要的中间体。其手性中心在药物研发中尤为关键，常用于构建具有特定立体构型的生物活性分子，尤其在蛋白酶抑制剂和 GPCR 靶向药物的结构优化中发挥重要作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域：

- 3.1 医药研发：作为构建抗肿瘤、抗病毒药物（如 HIV 蛋白酶抑制剂）的手性砌块。
- 3.2 肽化学：用于固相/液相多肽合成中保护氨基，后续可通过氢解脱除 Cbz 基团。
- 3.3 荧光探针开发：氟苯基团可作为 ¹⁹F NMR 标记物，用于生物分子相互作用研究。
- 3.4 不对称催化：作为手性配体或催化剂前体应用于有机合成。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：建议密封保存于-20° C 干燥环境中，避免光照与湿气，长期储存

需充惰性气体保护。

4.2 溶解性：推荐使用 DMF 或 THF 溶解，水溶液需调节 pH 至碱性（如加入 0.1M NaOH）。

4.3 稳定性：在 pH 4-8 缓冲液中稳定，强酸/强碱条件下可能发生酯水解或脱保护反应。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC（C18 柱，乙腈/水梯度洗脱）检测纯度，质谱（ESI-MS）验证分子量。

5.2 安全操作：佩戴防护手套/眼镜，避免吸入粉尘。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。

5.3 废弃物处理：按危险有机氟化合物处置，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。