

Boc-(S)-3-amino-4-(3,4-difluorophenyl)butyric acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Boc-(S)-3-amino-4-(3,4-difluorophenyl)butyric acid
产品目录号	
CAS 号	270063-54-2
分子式	C ₁₅ H ₁₉ F ₂ N ₀₄
分子量	315.313
纯度	>96%

产品说明

Boc-(S)-3-amino-4-(3,4-difluorophenyl)butyric acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

Boc-(S)-3-amino-4-(3,4-difluorophenyl)butyric acid 是一种具有光学活性的氨基酸衍生物，化学式为 C₁₅H₁₉F₂N₀₄，分子量为 315.313。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在，CAS 号为 270063-54-2，纯度经 HPLC 验证大于 96%。其结构包含 Boc（叔丁氧羰基）保护基团、3,4-二氟苯基疏水性芳环以及羧酸官能团，兼具手性中心和两亲性特征，在有机溶剂如 DMSO、甲醇中具有良好溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为非天然氨基酸构建单元，该分子在肽类药物的理性设计中发挥关键作用。Boc 保护基可选择性脱除，确保氨基在固相肽合成（SPPS）中的定向偶联；3,4-二氟苯基的引入能增强肽链的膜穿透性并调节靶标蛋白结合亲和力。其手性中心（S 构型）可精确控制肽链的空间构象，对生物活性具有决定性影响。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- 1) 抗肿瘤肽及抗菌肽的合成，通过氟原子修饰提高代谢稳定性
- 2) G 蛋白偶联受体（GPCR）配体的结构优化，用于神经系统疾病药物开发
- 3) 作为蛋白酶抑制剂的中间体，特别是针对含苯丙氨酸结合位点的靶点
- 4) 荧光标记探针的构建，利用芳环结构进行光物理性质调控

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 干燥避光条件下长期储存，开封后需充氮密封。使用前需平衡至室温以避免吸湿，称量应在干燥环境中进行。溶解推荐使用无水 DMF 或二氯甲烷，若用于生物体系需进一步纯化去除痕量有机溶剂。工作浓度应根据具体实验体系优化，建议先进行 0.1-10 mM 范围的剂量探索。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC（254 nm 检测）验证单一主峰，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MS 及

NMR 谱图可应要求提供。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘。如接触皮肤应立即用大量清水冲洗。化学废弃物应按照有机卤化物类别处置。安全数据表（SDS）包含更详细的毒理学数据及应急处理方案，请在使用前查阅。

注：本产品仅限科研用途，不可用于诊断或治疗。实际应用前请充分验证化合物在特定体系中的适用性。