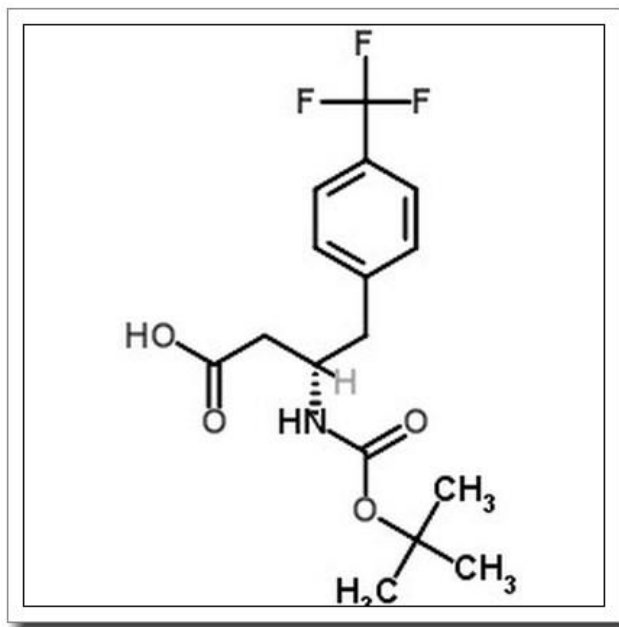


(S)-Boc-2-(三氟甲基)- β -Homophe-OH

Boc-(S)-3-amino-4-(4-trifluoromethylphenyl)-butyric acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	Boc-(S)-3-amino-4-(4-trifluoromethylphenyl)-butyric acid
中文名称	(S)-Boc-2-(三氟甲基)- β -Homophe-OH
CAS 号	270065-80-0
分子式	C ₁₆ H ₂₀ F ₃ N ₀ O ₄
分子量	347.329
纯度	>96%

产品说明

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

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Boc-(S)-3-amino-4-(4-trifluoromethylphenyl)-butyric acid, 中文命名为(S)-Boc-2-(三氟甲基)- β -Homophe-OH, CAS 号为 270065-80-0。其分子式为 C₁₆H₂₀F₃N₀₄, 分子量为 347.329, 纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有 Boc 保护基团和手性中心, 属于非天然氨基酸衍生物。三氟甲基的引入显著增强了其疏水性和代谢稳定性, 使其在药物化学中具有独特价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性氨基酸衍生物, 本产品在肽类药物的设计与合成中扮演关键角色。Boc 保护基团可在酸性条件下脱除, 便于后续偶联反应。三氟甲基苯基结构赋予其特殊的电子效应和空间位阻, 常用于调节肽链构象或增强靶标结合能力。其在蛋白酶抑制剂、GPCR 配体及抗体偶联药物 (ADC) 的 linker 设计中具有广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 3.1 药物研发: 作为中间体用于合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物, 尤其适用于需要增强血脑屏障穿透性的分子设计。
- 3.2 肽类修饰: 用于构建含三氟甲基的非天然氨基酸肽段, 提高肽类化合物的稳定性和生物活性。
- 3.3 化学生物学: 作为探针分子研究蛋白质-配体相互作用机制。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 需密封保存于-20° C 干燥环境中, 避免光照与湿气。长期储存建议充入惰性气体保护。
- 4.2 使用建议: 称取前需恢复至室温以防止吸湿。溶解推荐使用 DMF 或二氯甲烷等有机溶剂。操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，旋光度测定确保光学纯度，质谱与核磁共振验证结构准确性。

5.2 安全信息：本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套及护目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需结合实验方案进一步优化条件。