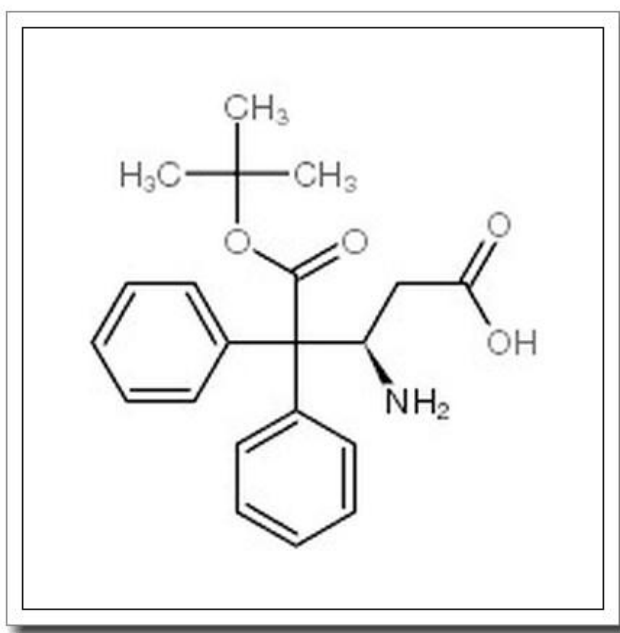


(BR)-B-[[(1,1-二甲基乙氧基)羰基]氨基]- Γ -苯基苯丙酸

(3R)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-4,4-diphenylbutanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3R)-3-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-4,4-diphenylbutanoic acid
中文名称	(BR)-B-[[(1,1-二甲基乙氧基)羰基]氨基]- Γ -苯基苯丙酸
CAS 号	332062-06-3
分子式	C ₂₁ H ₂₅ N ₀₄
分子量	355.428
纯度	>96%

产品说明

(3R)-3-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基氨基]-4,4-二苯基丁酸产品说明书

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 (3R)-3-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基氨基]-4,4-二苯基丁酸，中文别名 (BR)-B-[[(1,1-二甲基乙氧基)羰基]氨基]- Γ -苯基苯丙酸，CAS 号 332062-06-3。分子式为 C₂₁H₂₅N₀₄，分子量 355.428，纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ 。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基与手性中心 (R 构型) 赋予其特殊空间位阻效应，可溶于二甲基亚砷 (DMSO)、甲醇等有机溶剂，水溶性较差 ($< 0.1 \text{ mg/mL}$, 25°C)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性氨基酸衍生物，在肽类合成中具有关键应用价值。Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除，而其 4,4-二苯基结构能模拟蛋白质疏水相互作用位点。研究表明，该分子可作为 β -转角构象诱导剂，用于设计靶向 GPCR 受体的多肽药物，尤其在神经递质调节剂开发中具有潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药研发：作为中间体用于合成非天然氨基酸类抗凝血剂、镇痛肽及病毒蛋白酶抑制剂。

3.2 材料科学：用于制备手性液晶材料的核心骨架。

3.3 学术研究：在酶底物特异性分析中作为竞争性抑制剂探针。

典型使用浓度为 1-10 mM (DMSO 配制)，建议通过质谱 (MS) 或核磁共振 (NMR) 验证衍生化产物。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C、惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中，避免光照与湿度。开封后需在干燥器内保存，建议分装使用以减少反复冻融。工作溶液现配现用，若需保存应置于 -80°C (≤ 3 个月)。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

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 ($[\alpha]_{D20} +15^\circ$ 至 $+25^\circ$, $c=1$ in CHCl_3) 及重金属含量 (<10 ppm)。根据 GHS 分类, 该产品可能造成眼睛刺激 (类别 2B), 使用时应佩戴护目镜与丁腈手套。废弃物处理需符合有机卤化物处置规范, 建议通过专业化学品回收公司处理。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。)