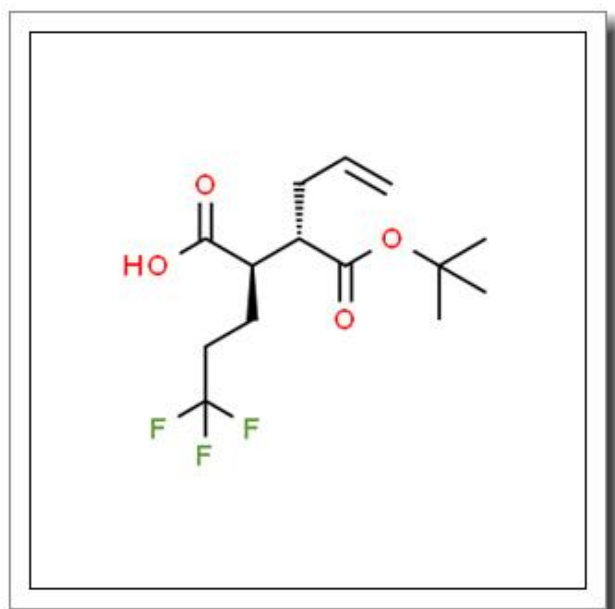


(2R,3S)-3-(叔丁氧基羰基)-2-(3,3,3-三氟丙基)己-5-烯酸

Butanedioic acid, 2-(2-propen-1-yl)-3-(3,3,3-trifluoropropyl)-, 1-(1,1-dimethylethyl) ester, (2S,3R)-



产品基本信息

属性	值
化学名称	Butanedioic acid, 2-(2-propen-1-yl)-3-(3,3,3-trifluoropropyl)-, 1-(1,1-dimethylethyl) ester, (2S,3R)-
中文名称	(2R,3S)-3-(叔丁氧基羰基)-2-(3,3,3-三氟丙基)己-5-烯酸
CAS号	1581735-07-0
分子式	C ₁₄ H ₂₁ F ₃ O ₄
分子量	310.31
纯度	≥96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(2R, 3S)-3-(叔丁氧基羰基)-2-(3, 3, 3-三氟丙基)己-5-烯酸, 化学名称 Butanedioic acid, 2-(2-propen-1-yl)-3-(3, 3, 3-trifluoropropyl)-, 1-(1, 1-dimethylethyl) ester, (2S, 3R)-, CAS 号为 1581735-07-0。其分子式为 C₁₄H₂₁F₃O₄, 分子量为 310.31, 纯度 ≥96%。该化合物是一种含氟手性羧酸衍生物, 具有特定的立体构型 (2R, 3S), 其结构中的叔丁氧基羰基 (Boc) 保护基和三氟丙基赋予其独特的化学稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成和药物化学中具有重要价值。其手性中心和含氟基团使其成为构建复杂分子 (如药物中间体或生物活性分子) 的关键砌块。三氟甲基的引入可显著改善化合物的脂溶性、代谢稳定性和生物利用度, 因此在药物设计中被广泛应用。此外, Boc 保护基的存在使其在肽类合成和多步反应中具有较高的可控性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和精细化学品合成领域, 具体包括:

- 作为手性合成子, 用于构建含氟药物中间体;
- 用于蛋白酶抑制剂或受体调节剂的开发;
- 在不对称催化反应中作为配体或底物;
- 作为科研用标准品, 用于分析方法开发和质控。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于-20° C 或更低温度的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 以防止降解。使用前需恢复至室温并充分摇匀。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 ≥96%。MS 和 NMR 数据可用于进一步验证结构。安全

信息如下:

- 可能对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性;
- 避免吸入粉尘或接触皮肤;
- 如不慎接触, 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。

如需更多技术资料或 COA, 请联系供应商获取。