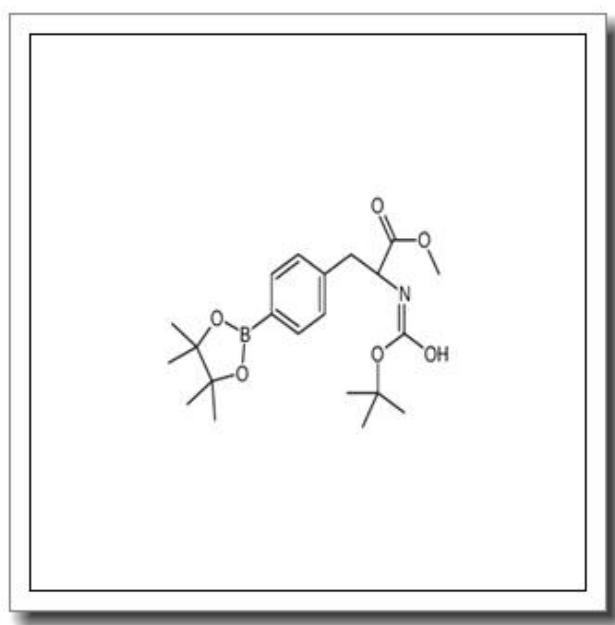


# (2S)-2-[(叔丁氧羰基)氨基]-3-[4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环戊硼烷-2-基)苯基]丙酸甲酯

*Methyl N-}[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl}-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-L-phenylalaninate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl N-}[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl}-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-L-phenylalaninate
中文名称	(2S)-2-[(叔丁氧羰基)氨基]-3-[4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环戊硼烷-2-基)苯基]丙酸甲酯
CAS 号	220587-29-1
分子式	C <sub>21</sub> H <sub>32</sub> BN <sub>0</sub> O <sub>6</sub>
分子量	405.293

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(2S)-2-[(叔丁氧羰基)氨基]-3-[4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环戊硼烷-2-基)苯基]丙酸甲酯，CAS 号为 220587-29-1，分子式为 C<sub>21</sub>H<sub>32</sub>BN<sub>06</sub>，分子量 405.293。其结构包含硼酸酯基团和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基，纯度 ≥96% (HPLC 测定)，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水。该化合物是 L-苯丙氨酸衍生物，兼具氨基酸的立体选择性与硼酸酯的反应活性。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类中间体，本品在 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应中可作为关键砌块，用于构建碳-碳键。Boc 保护基在肽合成中提供氨基保护，避免副反应；硼酸酯基团则能与卤代芳烃高效偶联，广泛应用于药物分子及生物活性化合物的结构修饰。其手性中心确保了产物立体构型的精确控制，对合成手性药物尤为重要。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发与有机合成领域：

- (1) 抗肿瘤药物：作为 EGFR 抑制剂、蛋白酶体抑制剂等靶向药物的中间体；
- (2) PET 显影剂：用于放射性标记前体的合成；
- (3) 材料科学：制备含硼有机光电材料；
- (4) 学术研究：用于探索新型硼酸介导的生物共轭反应。

### 4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、惰性气体（如氩气）保护的干燥环境中，避免光照与湿气。开封后建议分装使用，剩余物料需充氮密封。溶解时优先选用无水 DMSO，反应体系需严格除氧。操作时佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中进行。

### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次质检，确保杂质含量 <4%。本品对眼睛、皮肤有刺激性，接触后立即用大量清水冲洗。CAS 号 220587-29-1 对应的 GHS 分类为 H315-

H319-H335, 需参照 SDS 文件规范处置废弃物。运输时归类为非危险化学品, 但需避免与强氧化剂共存。