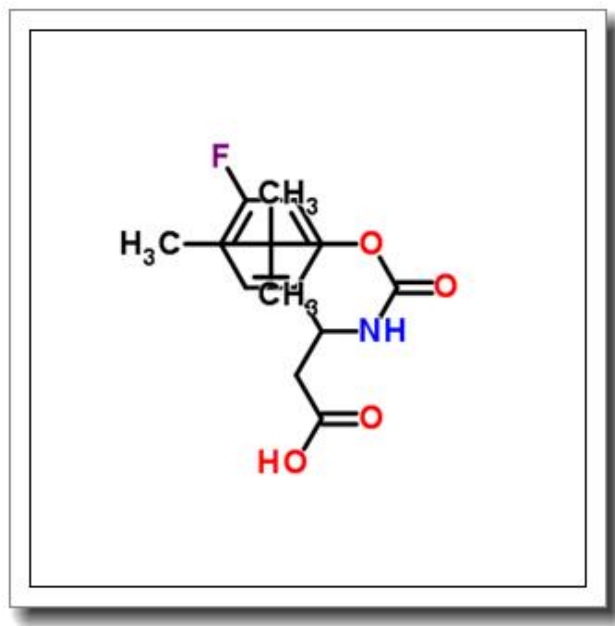


3-(Boc-氨基)-3-(4-氟苯基)丙酸

3-[(tert-Butoxycarbonyl)amino]-3-(4-fluorophenyl)-propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[(tert-Butoxycarbonyl)amino]-3-(4-fluorophenyl)-propanoic acid
中文名称	3-(Boc-氨基)-3-(4-氟苯基)丙酸
CAS 号	284493-72-7
分子式	C ₁₄ H ₁₈ FNO ₄
分子量	283.295
纯度	≥96%

产品说明

3-[(叔丁氧羰基)氨基]-3-(4-氟苯基)丙酸产品说明书

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 3-[(tert-Butoxycarbonyl)amino]-3-(4-fluorophenyl)-propanoic acid，分子式 C₁₄H₁₈FN₀₄，分子量 283.295，CAS 号 284493-72-7。其结构包含 Boc 保护氨基、4-氟苯基及羧酸基团，赋予其独特的两亲性。纯度 ≥96% (HPLC)，熔点为 98-102℃，易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Boc 保护的氨基酸衍生物，该化合物在肽合成中充当关键中间体。Boc 基团可选择性脱保护，确保氨基在固相合成中的定向偶联。4-氟苯基的引入增强了分子的疏水性及生物活性，常用于设计靶向神经递质或酶抑制剂的药物分子。其羧酸基团便于进一步酯化或酰胺化修饰，拓展了结构多样性。

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：

- 肽类药物合成中作为非天然氨基酸砌块
- 氟化生物活性分子的前体，如抗抑郁剂或抗炎剂
- 用于构建蛋白酶抑制剂的核心骨架
- 作为手性拆分试剂或催化剂配体的合成中间体

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃干燥避光环境，惰性气体保护可延长稳定性。开封后建议分装使用，避免反复冻融。溶解时优先选用 DMSO (浓度 ≤50 mM)，水溶液需现配现用。操作时佩戴防尘口罩、护目镜及丁腈手套，确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次质检，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：急性毒

性（口服，大鼠）LD50 > 2000 mg/kg，皮肤刺激性类别 3。若接触眼睛，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品法规。

（注：本说明基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新材料安全数据表 MSDS 并开展小试验证。）