

BOC-D-3-甲基苯丙氨酸

Boc-3-methyl-D-phenylalanine



产品基本信息

属性	值
化学名称	Boc-3-methyl-D-phenylalanine
中文名称	BOC-D-3-甲基苯丙氨酸
CAS 号	114873-14-2
分子式	C ₁₅ H ₂₁ N ₀₄
分子量	279.332
纯度	≥ 96%

产品说明

Boc-3-methyl-D-phenylalanine 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

Boc-3-methyl-D-phenylalanine (BOC-D-3-甲基苯丙氨酸) 是一种非天然氨基酸衍生物, 化学式为 $C_{15}H_{21}NO_4$, 分子量 279.332, CAS 号为 114873-14-2。该化合物在常温下为白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团和 D-构型的手性中心。其结构中的甲基修饰赋予其独特的空间位阻效应, 在肽类合成中可调节构象稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 D-型氨基酸衍生物, 本产品可在肽链修饰中能抵抗蛋白酶降解, 显著延长合成肽的半衰期。Boc 基团在酸性条件下可选择性脱除, 使其成为固相肽合成 (SPPS) 的关键中间体。3-甲基的引入可增强疏水性, 影响肽链与靶蛋白的相互作用, 在药物设计中用于优化药效团的空间匹配性。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于以下领域:

- 多肽药物开发: 作为构象限制性氨基酸, 用于合成抗肿瘤、抗病毒肽类候选药物
- PROTAC 技术: 作为连接子组分, 调控靶蛋白降解效率
- 材料科学: 制备自组装肽基纳米材料的功能性单体
- 酶学研究: D-型结构可用于设计蛋白酶特异性抑制剂

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于 $-20^{\circ}C$ 干燥避光环境, 惰性气体保护可延长稳定性。使用前需恢复至室温并保持干燥, 建议在手套箱中称量。溶解性测试表明, 其易溶于 DMF、DCM 等有机溶剂, 水溶性较差 ($< 0.1 \text{ mg/mL}$)。实验级使用推荐浓度 1-10 mM, 需通过薄层色谱 (TLC) 监测反应进程。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (反相 C18 柱) 检测纯度, 质谱 (ESI-MS) 验证分子量。产品含微量水

分 ($\leq 0.5\%$)，重金属含量符合 USP 标准。安全数据：急性毒性 (LD50 大鼠口服) >2000 mg/kg，但接触可能引起眼睛刺激。操作时需佩戴护目镜和防尘口罩，溢出处理需用惰性吸附材料。废弃物应作为有机卤化物分类处置。

(注：本说明基于当前研究数据，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。)