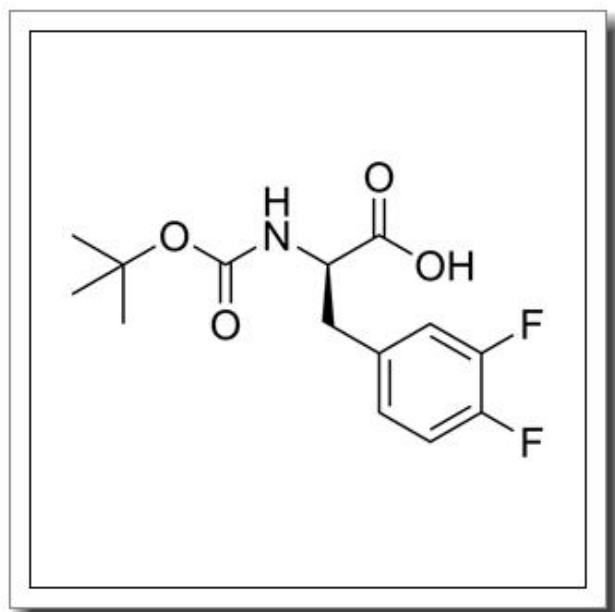


# BOC-D-3,4-二氟苯丙氨酸

*(2R)-3-(3,4-difluorophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(2R)-3-(3,4-difluorophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid
中文名称	BOC-D-3,4-二氟苯丙氨酸
CAS 号	205445-51-8
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> F <sub>2</sub> N <sub>1</sub> O <sub>4</sub>
分子量	301.286
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

(2R)-3-(3,4-二氟苯基)-2-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基氨基]丙酸 (BOC-D-3,4-二氟苯丙氨酸) 是一种手性非天然氨基酸衍生物, CAS 号为 205445-51-8, 分子式  $C_{14}H_{17}F_2N_2O_4$ , 分子量 301.286。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有显著的立体选择性和化学稳定性。其结构中的 BOC 保护基 (叔丁氧羰基) 和 3,4-二氟苯基侧链赋予其独特的空间位阻效应与疏水性, 适用于肽合成中的定向修饰。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为 D-构型氨基酸衍生物, 本品在肽类药物设计中能有效抵抗酶降解, 延长生物半衰期。二氟苯基的引入可增强分子脂溶性, 优化药物膜穿透性, 而 BOC 保护基在固相肽合成 (SPPS) 中可通过酸性条件选择性脱除。这些特性使其成为构效关系研究和活性肽改造的关键砌块, 尤其在靶向 GPCR (G 蛋白偶联受体) 的药物开发中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 创新药物研发: 作为 Fmoc/tBoc 策略中 D-氨基酸前体, 用于构建抗肿瘤、抗病毒肽类候选化合物
- 放射性标记探针: 通过氟原子位点进行  $^{18}F$  标记, 开发 PET 显影剂
- 材料科学: 作为手性模板用于液晶材料分子设计
- 酶学研究: 模拟天然底物研究酶立体选择性

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需平衡至室温以防止结露。溶解性测试表明, 本品在 DMF、DMSO 中溶解度  $>50mg/mL$ , 建议先用少量极性溶剂预溶后再加入反应体系。操作时应避免与强氧化剂接触, 反应投料需在干燥环境下进行。

## 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 和质谱联用技术确保纯度  $\geq 96\%$ , 单杂  $\leq 0.5\%$ 。产品符合 USP 级标准, 批号关联完整 COA 报告。安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服)  $> 2000\text{mg/kg}$ , 属于刺激性化学品, 操作时需佩戴护目镜与丁腈手套。废弃物处置应遵守当地有机氟化合物处理法规, 建议采用专业焚烧处理。