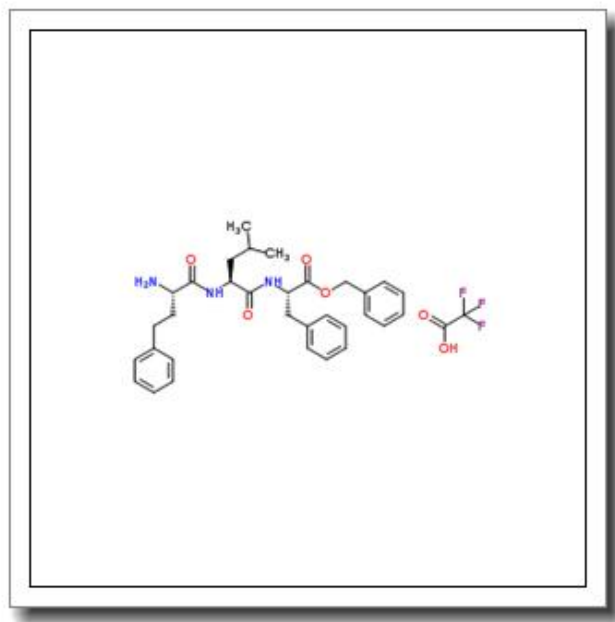


Benzyl N-[(2S)-2-amino-4-phenylbutanoyl]-L-leucyl-L-phenylalaninate trifluoroacetate (1:1)

Benzyl N-[(2S)-2-amino-4-phenylbutanoyl]-L-leucyl-L-phenylalaninate trifluoroacetate (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzyl N-[(2S)-2-amino-4-phenylbutanoyl]-L-leucyl-L-phenylalaninate trifluoroacetate (1:1)
中文名称	Benzyl N-[(2S)-2-amino-4-phenylbutanoyl]-L-leucyl-L-phenylalaninate trifluoroacetate (1:1)
CAS 号	875309-83-4
分子式	C34H40F3N3O6
分子量	643. 693

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

以下是一份专业的产品说明文档:

产品概述与化学特性

本产品为 Benzyl N-[(2S)-2-amino-4-phenylbutanoyl]-L-leucyl-L-phenylalaninate trifluoroacetate (1:1), 化学名称符合 IUPAC 命名规则, CAS 号为 875309-83-4。其分子式为 C₃₄H₄₀F₃N₃O₆, 分子量为 643.693, 纯度 ≥96%。该化合物是一种含有苯丙氨酸和亮氨酸残基的修饰肽衍生物, 结构中包含三氟乙酸根离子 (1:1), 呈现白色至类白色结晶或粉末状。其溶解性表现为易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水, 需注意其光学活性 (S 构型) 对生物活性的潜在影响。

生物化学功能与重要性

该分子通过模拟天然肽链的立体结构, 可作为蛋白酶抑制剂或受体拮抗剂的核心骨架。其苯环结构与氨基酸侧链的协同作用, 赋予其特异性结合靶标蛋白的能力, 在调控细胞信号转导中具有潜在价值。三氟乙酸根的引入增强了化合物的稳定性和结晶性, 而苄酯基团则为后续衍生化提供了修饰位点, 使其成为药物化学研究中的重要中间体。

主要应用领域与具体用途

1. 药物研发: 作为先导化合物用于设计抗肿瘤、抗炎或神经退行性疾病治疗药物
2. 生化工具: 用于研究蛋白酶底物特异性或蛋白质-蛋白质相互作用机制
3. 肽类合成: 作为保护氨基酸砌块应用于固相肽合成 (SPPS)
4. 结构生物学: 辅助解析膜蛋白或难结晶蛋白的三维结构

储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃惰性气体 (如氩气) 环境中, 短期使用可存放于 2-8℃干燥避光条件。开封后需充氮密封, 避免反复冻融。使用时建议先以 DMSO 配制母液 (浓度 10-50 mM), 再稀释至工作浓度。注意该化合物对湿度和温度敏感, 实验操作应在干燥环境下快速完成。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，质谱 (MS) 和核磁 (NMR) 验证结构一致性。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照有机卤化物标准处理，严禁直接排放。安全数据表 (SDS) 包含详细毒理学数据，使用前请务必查阅。