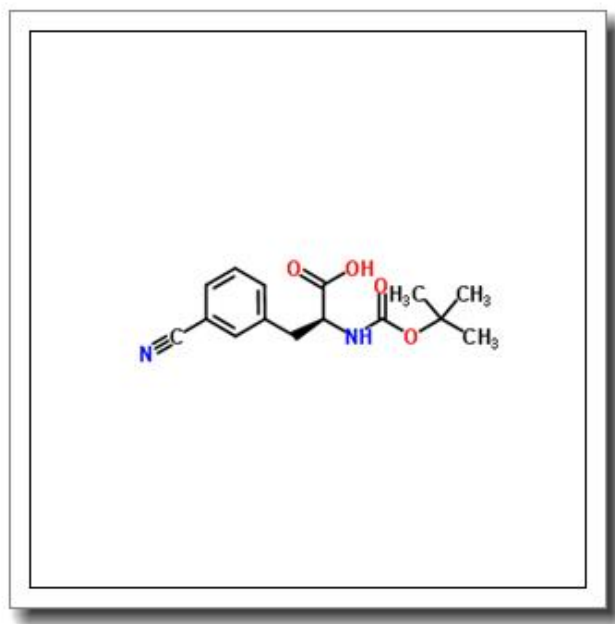


Boc-D-3-氰基苯丙氨酸

(2R)-3-(3-cyanophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2R)-3-(3-cyanophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid
中文名称	Boc-D-3-氰基苯丙氨酸
CAS 号	205445-56-3
分子式	C ₁₅ H ₁₈ N ₂ O ₄
分子量	290.314
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2R)-3-(3-cyanophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid (Boc-D-3-氰基苯丙氨酸) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 205445-56-3, 分子式为 C₁₅H₁₈N₂O₄, 分子量为 290.314。该化合物属于氨基酸衍生物, 结构中含有氰基苯基和 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团, 纯度 ≥96%, 外观通常为白色至类白色结晶性粉末。其化学结构中的手性中心 (R 构型) 和官能团特性使其在生物化学和药物研发中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

Boc-D-3-氰基苯丙氨酸是一种非天然氨基酸衍生物, 其氰基苯基结构赋予其独特的电子效应和空间位阻, 可作为蛋白质或多肽合成中的关键砌块。Boc 保护基团在固相肽合成 (SPPS) 中提供氨基保护, 确保定向偶联反应的顺利进行。此外, 氰基的强极性使其在分子识别和酶抑制研究中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于药物化学、肽合成及生物标记领域。具体用途包括: 1) 作为中间体用于合成具有生物活性的多肽或小分子药物; 2) 在结构生物学中用于研究蛋白质-配体相互作用; 3) 作为探针分子开发酶抑制剂或受体调节剂。其手性特性尤其适用于不对称合成和立体选择性反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下干燥避光保存, 长期储存需充惰性气体 (如氮气) 保护。开封后应避免反复冻融, 使用时需在干燥环境中操作。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性较差, 建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间一致性。安全注意事项: 1) 避免吸入粉尘或接触皮肤, 操作时需佩戴防护手套和护目镜; 2) 氰基官能

团在强酸或强碱条件下可能释放微量氰化氢，应在通风橱中处理；3) 废弃物需按危险化学品规范处置。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

(注：本说明基于现有技术资料编写，具体实验条件需用户根据实际需求优化。)