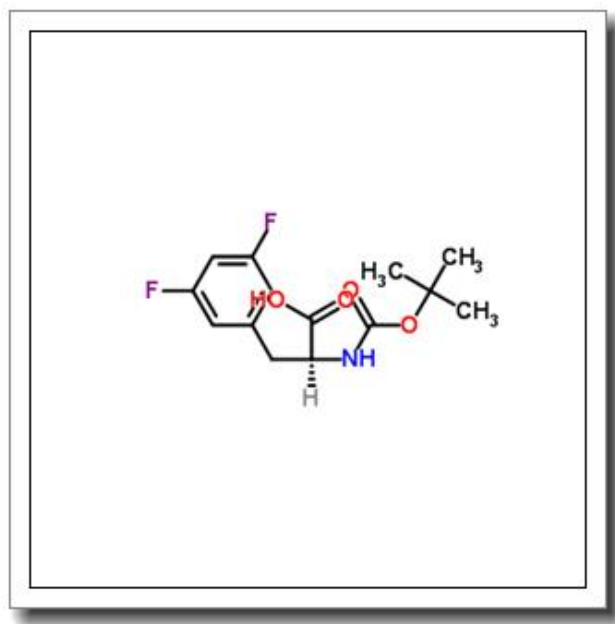


Boc-D-3,5-二氟苯丙氨酸

(2R)-3-(3,5-difluorophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2R)-3-(3,5-difluorophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid
中文名称	Boc-D-3,5-二氟苯丙氨酸
CAS 号	205445-53-0
分子式	C ₁₄ H ₁₇ F ₂ N ₁ O ₄
分子量	301.286
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2R)-3-(3,5-二氟苯基)-2-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基氨基]丙酸 (Boc-D-3,5-二氟苯丙氨酸) 是一种具有光学活性的非天然氨基酸衍生物, CAS 号为 205445-53-0, 分子式为 $C_{14}H_{17}F_2N_2O_4$, 分子量 301.286。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 其结构中的 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团和 3,5-二氟苯基侧链赋予其独特的化学稳定性与空间位阻效应, 适用于手性合成与多肽修饰。

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可增强代谢稳定性并抵抗酶降解。3,5-二氟苯基的强疏水性和电子效应能显著改变多肽的膜穿透性与靶标结合能力, 常用于构建 GPCR 配体或蛋白酶抑制剂。Boc 保护基在酸性条件下可选择性脱除, 使其成为固相肽合成 (SPPS) 中的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发领域, 特别是抗肿瘤、神经退行性疾病及抗病毒肽类药物的结构优化。具体用途包括: 1) 作为非天然氨基酸单体用于构建具有增强生物活性的多肽类似物; 2) 在 ADC (抗体偶联药物) 连接子设计中作为疏水片段; 3) 用于手性催化剂或有机小分子药物的合成砌块。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥避光条件下长期储存, 开封后需充惰性气体保护。使用前需平衡至室温以避免吸湿, 溶解时可选用 DMF、DMSO 或二氯甲烷等有机溶剂。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

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。安全数据表明其属于刺激性化学品 (GHS 分类: H315-H319-H335), 需佩戴防护手套和护目镜操作。如意外接触眼睛, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。