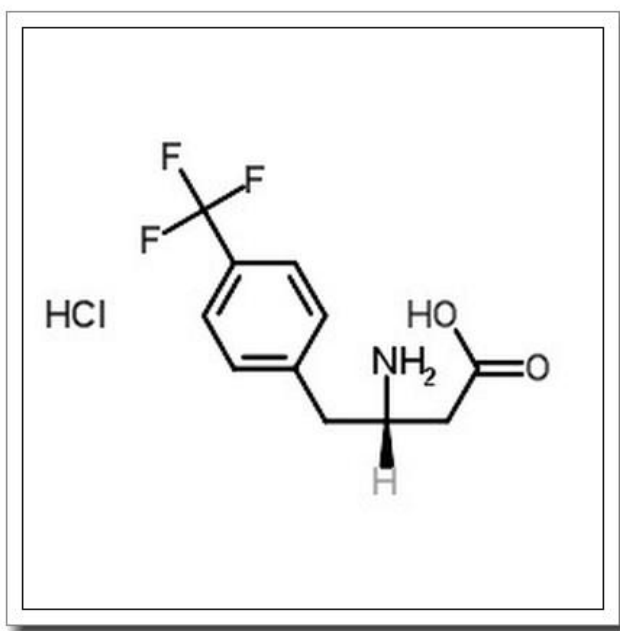


(S)-3-氨基-4-(4-三氟甲基苯基)丁酸盐 酸盐

(3S)-3-amino-4-[4-(trifluoromethyl)phenyl]butanoic acid, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3S)-3-amino-4-[4-(trifluoromethyl)phenyl]butanoic acid, hydrochloride
中文名称	(S)-3-氨基-4-(4-三氟甲基苯基)丁酸盐 盐酸盐
CAS 号	270065-79-7
分子式	C ₁₁ H ₁₃ ClF ₃ N ₂ O ₂
分子量	283.675
纯度	>96%

产品说明

(S)-3-氨基-4-(4-三氟甲基苯基)丁酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(3S)-3-amino-4-[4-(trifluoromethyl)phenyl]butanoic acid, hydrochloride，分子式 C₁₁H₁₃ClF₃N₂O₂，分子量 283.675，CAS 号 270065-79-7。其结构中包含手性中心（S 构型）、三氟甲基苯基团及羧酸基团，赋予其独特的极性和生物活性。盐酸盐形式提高了化合物的水溶性与稳定性，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性氨基酸衍生物，可通过模拟天然氨基酸结构参与酶抑制或受体调节过程。三氟甲基的强吸电子效应可增强其与靶标蛋白的疏水相互作用，在药物研发中常用于优化先导化合物的代谢稳定性和结合亲和力。其立体构型（S 型）对生物活性具有关键影响，可能作为特定酶或转运体的选择性配体。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，尤其作为以下研究的中间体或工具化合物：

- 神经递质相关酶（如 GABA 转氨酶）抑制剂的合成
- 抗抑郁或抗焦虑药物开发中结构修饰的关键砌块
- 放射性标记探针制备，用于靶标结合实验
- 不对称催化反应的手性模板

4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中，建议温度 -20° C，干燥惰性气体保护。开封后需充氮保存以避免吸湿。使用时于干燥环境下称量，溶解推荐使用 DMSO 或 pH 缓冲盐水（需测试溶解度）。长期保存建议分装，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包括 NMR、LC-MS 及旋光度检测，确保构型与纯度符合标准。安全数据：

- 危害提示：H315-H319（皮肤/眼刺激）

- 防护措施: 佩戴护目镜与防尘口罩, 避免吸入
- 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗
- 废弃物处置: 按危险化学品规范处理

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献或进行预实验验证。