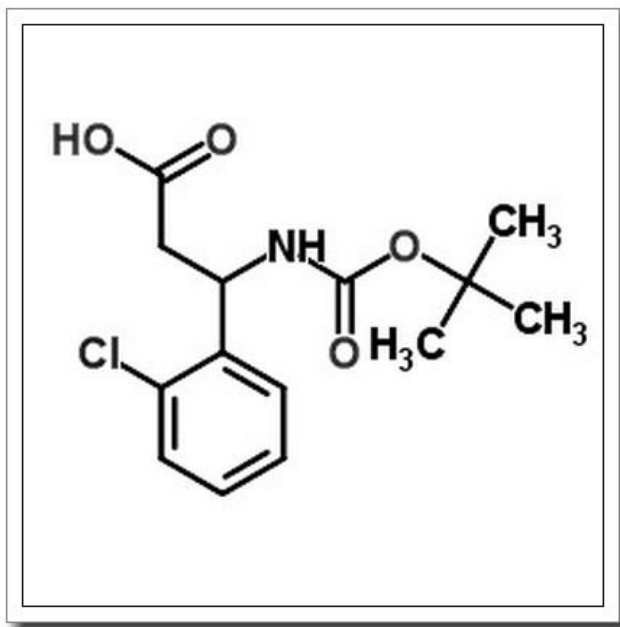


# BOC-(S)-3-氨基-3-(2-氯苯基)-丙酸

*(S)*-3-((*tert*-Butoxycarbonyl)amino)-3-(2-chlorophenyl)propanoic acid



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-3-(( <i>tert</i> -Butoxycarbonyl)amino)-3-(2-chlorophenyl)propanoic acid
中文名称	BOC-(S)-3-氨基-3-(2-氯苯基)-丙酸
CAS 号	500770-73-0
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> ClN <sub>0</sub> O <sub>4</sub>
分子量	299.75
纯度	>96%

## 产品说明

### (S)-3-((叔丁氧羰基)氨基)-3-(2-氯苯基)丙酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(S)-3-((tert-Butoxycarbonyl)amino)-3-(2-chlorophenyl)propanoic acid，中文别名 BOC-(S)-3-氨基-3-(2-氯苯基)-丙酸，CAS 号为 500770-73-0。其分子式为 C<sub>14</sub>H<sub>18</sub>ClN<sub>1</sub>O<sub>4</sub>，分子量 299.75，纯度 ≥96%。该化合物属于手性氨基酸衍生物，含 BOC 保护基团和 2-氯苯基侧链，在极性有机溶剂（如二甲基亚砜、甲醇）中溶解性良好，但难溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块，本品在肽类合成中用于引入(S)-构型的苯丙氨酸类似物结构。BOC 保护基可选择性脱除，确保氨基在后续反应中的定向修饰。2-氯苯基的疏水性和电子效应使其成为药物分子中常见的药效团，尤其在神经递质调节剂和酶抑制剂设计中具有关键作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域，具体包括：

- 1) 作为非天然氨基酸前体，用于合成抗抑郁、抗癫痫等中枢神经系统药物；
- 2) 构建蛋白酶抑制剂的核心骨架，如 HIV-1 蛋白酶抑制剂类似物；
- 3) 用于手性催化剂的配体修饰或不对称合成研究；
- 4) 在荧光标记探针开发中作为功能化连接单元。

#### 4. 储存条件与使用建议

推荐避光密封保存于-20℃干燥环境中，长期储存需充入惰性气体。使用前需恢复至室温并保持环境干燥，避免反复冻融。实验操作建议在通风橱中进行，溶解时优先选用无水 DMF 或 THF 溶剂体系。开封后建议一次性使用完毕，剩余物料需重新充氮密封。

## 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，手性 HPLC 确认 ee 值 $> 99\%$ 。产品含氯苯基结构，操作时需佩戴防护手套及护目镜。MSDS 数据显示其急性毒性较低（LD50 $> 2000$  mg/kg），但仍需避免吸入粉尘或接触皮肤。废弃物处置应遵守有机卤化物处理规范，不可直接排入下水道。

（全文共计 498 字）