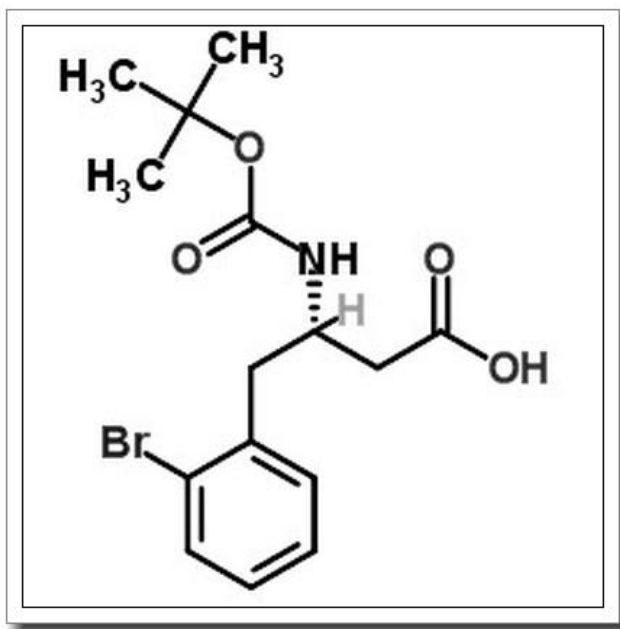


BOC-(S)-3-氨基-4-(2-溴苯基)-丁酸

(2S)-3-amino-4-(2-bromophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]butanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-3-amino-4-(2-bromophenyl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]butanoic acid
中文名称	BOC-(S)-3-氨基-4-(2-溴苯基)-丁酸
CAS 号	403661-78-9
分子式	C ₁₅ H ₂₀ BrN ₀₄
分子量	358. 228
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(2S)-3-氨基-4-(2-溴苯基)-2-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]丁酸, 中文名称为BOC-(S)-3-氨基-4-(2-溴苯基)-丁酸, CAS号为403661-78-9。其分子式为C₁₅H₂₀BrN₀₄, 分子量为358.228, 纯度高于96%。该化合物是一种手性氨基酸衍生物, 结构中包含BOC保护基团和溴代苯基团, 具有显著的立体化学特性。其固态为白色至类白色结晶粉末, 易溶于有机溶剂如二甲基亚砷(DMSO)和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为BOC保护的氨基酸衍生物, 该化合物在肽合成中具有重要作用。BOC基团可保护氨基免受不必要的反应, 同时在酸性条件下可选择性脱除, 使其成为多肽固相合成中的关键中间体。溴代苯基团为其提供了独特的疏水性和空间位阻, 可用于调节分子与生物靶标的相互作用。这类结构常见于药物活性分子的设计中, 尤其在GPCR配体和酶抑制剂开发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建含苯丙氨酸结构单元的重要前体, 可用于合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物。在肽类化合物研究中, 作为非天然氨基酸衍生物, 可用于探索肽链构效关系。此外, 其溴原子可作为进一步官能团化的位点, 通过偶联反应引入其他功能基团, 扩展分子多样性。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C下避光干燥保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应避免反复冻融, 建议分装使用。使用时需在干燥惰性气氛(如氮气或氩气)下操作, 避免与强氧化剂或强酸接触。溶解时可选用无水DMSO或甲醇作为溶剂, 配制溶液建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过HPLC检测纯度≥96%, 同时满足核磁共振(NMR)和质谱(MS)的结构确证

要求。安全方面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道产生刺激，操作时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。

请注意，本产品仅限研究用途，不适用于药物、食品或家庭用途。具体应用前请查阅相关文献并评估其适用性。