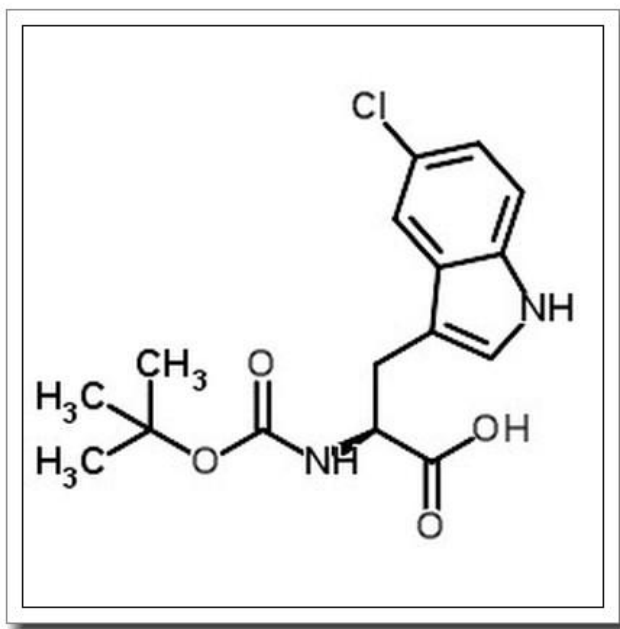


L-N-BOC-5-氯色氨酸

(2S)-3-(5-chloro-1H-indol-3-yl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-3-(5-chloro-1H-indol-3-yl)-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid
中文名称	L-N-BOC-5-氯色氨酸
CAS 号	114873-08-4
分子式	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂ O ₄
分子量	338.786
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S)-3-(5-氯-1H-吡啶-3-基)-2-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基氨基]丙酸 (L-N-BOC-5-氯色氨酸) 是一种重要的色氨酸衍生物，化学式为 $C_{16}H_{19}ClN_2O_4$ ，分子量为 338.786，CAS 号为 114873-08-4。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度高于 96%，具有手性中心 (S 构型)，结构中包含 BOC 保护基团 (叔丁氧羰基) 和 5-位氯取代的吡啶环。其疏水性和空间位阻特性使其在有机合成中表现出独特反应性。

2. 生物化学功能与重要性

作为色氨酸的修饰衍生物，本产品是合成多肽类化合物 (尤其含色氨酸残基的肽链) 的关键中间体。BOC 保护基团可选择性脱除，确保氨基在固相肽合成 (SPPS) 中的定向偶联。5-位氯取代增强了分子的电子效应，在药物设计中可用于调节受体结合活性或代谢稳定性。其结构特征使其成为神经递质类似物和蛋白酶抑制剂开发的重要砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于以下领域：

- 医药研发：用于合成具有抗抑郁、抗肿瘤活性的候选药物分子
- 肽化学：作为 Fmoc/t-Boc 策略中的保护氨基酸单体，特别适用于合成含色氨酸的抗菌肽
- 生物标记物：通过放射性同位素标记用于神经生物学研究
- 材料科学：作为功能化有机框架材料的合成前体

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体 (如氩气) 环境下长期储存。开封后需充氮密封，避免反复冻融。使用前需平衡至室温以防止结露。溶解性测试表明，该化合物易溶于 DMSO (50mg/mL)、甲醇，微溶于水 (需碱性条件)。建议在通风橱中操作，避免直接接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (UV 280nm 检测) 确保纯度 >96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。产品经质谱 (MS) 和核磁共振 ($^1\text{H}/^{13}\text{C}$ NMR) 验证结构。安全数据表明该化合物可能引起眼睛刺激 (GHS 分类: Eye Irrit. 2), 操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。废弃物需按危险化学品处理规范处置。提供完整 COA (分析证书) 和 MSDS (材料安全数据表) 备查。