

(S)-Methyl 2-amino-2-(3-fluoro-4-(trifluoromethyl)phenyl)acetate hydrochloride

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-Methyl 2-amino-2-(3-fluoro-4-(trifluoromethyl)phenyl)acetate hydrochloride
产品目录号	
CAS 号	2061996-78-7
分子式	C10H10ClF4N02
分子量	287.6385128
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-甲基-2-氨基-2-(3-氟-4-(三氟甲基)苯基)乙酸酯盐酸盐 (产品目录号: 待补充, CAS 号: 2061996-78-7) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{10}H_{10}ClF_4NO_2$, 分子量为 287.64。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度超过 96%, 具有显著的手性特征 (S 构型)。其结构中的氟和三氟甲基基团赋予其独特的电子效应和疏水性, 适合作为医药中间体或生化研究中的关键试剂。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物属于氨基酸衍生物, 其 α -氨基和酯基结构使其在肽类合成和药物设计中具有重要价值。氟原子的引入可增强代谢稳定性和生物膜穿透性, 而三氟甲基则可能调节靶标蛋白的亲合力。其在酶抑制或受体调节方面的潜在活性, 使其成为药物发现 (如中枢神经系统或抗感染领域) 的候选分子。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 1) 作为手性砌块用于抗抑郁或抗病毒药物的结构优化; 2) 用于荧光标记探针的合成, 研究蛋白质-配体相互作用; 3) 在不对称催化反应中作为配体或底物。其高纯度特性尤其适合对立体选择性要求严格的实验。

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, 短期使用可置于 $2-8^{\circ}C$ 环境。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 避免吸湿分解。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于甲醇、DMSO 等极性有机溶剂, 水溶性较低, 建议先用少量有机溶剂助溶后再稀释。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和质谱确保纯度 $>96\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据: 1) 急性毒性 (口服, 大鼠) LD_{50} 未明确, 按刺激性化学品处理; 2) 避免吸入粉尘或接触皮

肤，可能引起眼部刺激；3) 废弃物需按危险化学品法规处置。提供 MSDS 及 COA 文件，实验前请查阅详细安全参数。