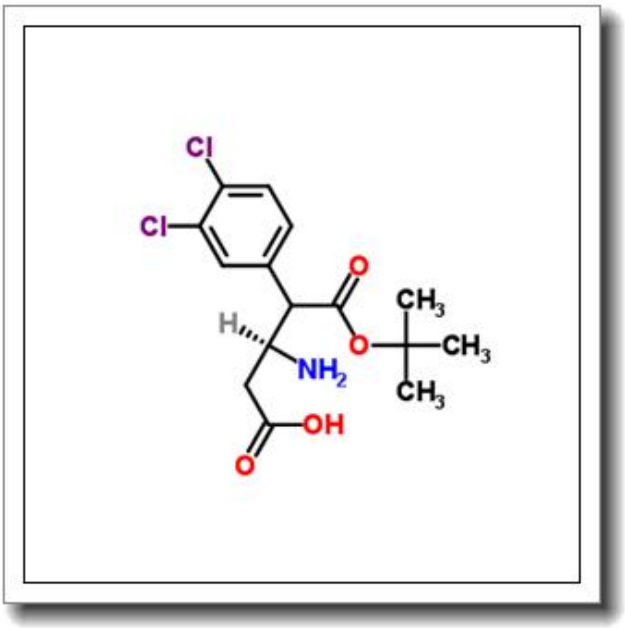
BOC-(S)-3-氨基-4-(3,4-二氯苯基)-丁酸

Boc-(S)-3-amino-4-(3,4-dichlorophenyl)butyric acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	Boc-(S)-3-amino-4-(3,4-dichlorophenyl)butyric acid
中文名称	BOC-(S)-3-氨基-4-(3,4-二氯苯基)-丁酸
CAS 号	270063-51-9
分子式	C15H19Cl2NO4
分子量	348.222
纯度	≧96%

产品说明

BOC-(S)-3-氨基-4-(3,4-二氯苯基)-丁酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

BOC-(S)-3-氨基-4-(3,4-二氯苯基)-丁酸（CAS 号：270063-51-9）是一种重要的手性氨基酸衍生物，化学式为 C15H19C12NO4，分子量为 348.222。该化合物以 BOC（叔丁氧羰基）为保护基，结构中含有 3,4-二氯苯基和羧酸官能团，具有显著的空间位阻和立体选择性。其纯度≥96%，常温下为白色至类白色结晶粉末，可溶于有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，难溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性构建单元，该化合物在肽类合成中广泛用于引入(S)-构型的β-氨基酸结构。其 3,4-二氯苯基增强了疏水性，而 BOC 保护基在酸性条件下可选择性脱除，使其成为多肽固相合成和药物分子设计的关键中间体。此外，其结构特性对调节生物活性分子的立体构效关系具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 药物研发：作为蛋白酶抑制剂、GPCR 配体等靶向药物的合成前体。
- 肽类修饰：用于构建非天然氨基酸片段，增强肽链的代谢稳定性。
- 材料科学：作为功能化高分子单体的手性模板。

典型应用案例包括抗抑郁药物和抗病毒化合物的中间体制备。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。使用时需在干燥氮气环境下操作，避免反复冻融。溶解建议使用无水 DMSO，配制成溶液后建议分装并短期内使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：

- 危害标识：H315（皮肤刺激）、H319（眼刺激）、H335（呼吸道刺激）。

- 防护措施：操作时佩戴防尘口罩、化学护目镜及丁腈手套，在通风橱中处理。
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理，避免直接接触环境水体。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体技术参数请参阅随附的分析证书（COA）。