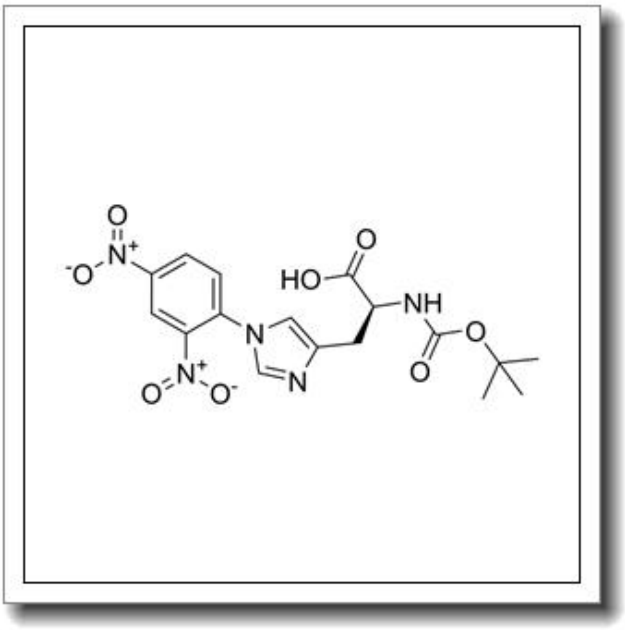
N-Boc-1-(2,4-二硝基苯基)-L-组氨酸

(2S)-3-[1-(2,4-dinitrophenyl)imidazol-4-yl]-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-3-[1-(2,4-dinitrophenyl)imidazol-4-yl]-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid
中文名称	N-Boc-1-(2,4-二硝基苯基)-L-组氨酸
CAS 号	25024-53-7
分子式	C17H19N5O8
分子量	421.362
纯度	≧96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为N-Boc-1-(2,4-二硝基苯基)-L-组氨酸（(2S)-3-[1-(2,4-dinitrophenyl)imidazol-4-yl]-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]propanoic acid），CAS号25024-53-7，分子式C17H19N5O8，分子量421.362，纯度≥96%。该化合物为淡黄色至棕色结晶性粉末，具有明确的立体构型（L-构型），结构中含二硝基苯基、咪唑环及Boc保护基团，兼具芳香族化合物的稳定性和氨基酸衍生物的反应活性。其溶解性表现为微溶于水，易溶于极性有机溶剂如DMSO、DMF。

2. 生物化学功能与重要性

作为组氨酸的修饰衍生物，本品通过二硝基苯基（DNP）标记实现生物分子（如蛋白质、多肽）的定向修饰，广泛应用于抗原-抗体相互作用研究。Boc保护基的存在使其在固相合成中可作为中间体，选择性脱保护后进一步偶联。其独特的结构使其成为研究酶活性位点、蛋白质标记及免疫检测的重要工具化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：

(1) 免疫化学：作为半抗原用于抗DNP抗体制备；

(2) 蛋白质组学：标记蛋白质巯基或氨基，用于质谱分析或荧光检测；

(3) 药物研发：作为蛋白酶抑制剂设计的中间体；

(4) 材料科学：功能化高分子材料的合成原料。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥环境中，有效期24个月。开封后建议充氮密封保存。使用时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解推荐使用无水DMSO，工作浓度需根据实验体系优化。注意Boc基团在酸性条件下易脱除，需控制反应pH。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度≥96%，水分含量≤0.5%，残留溶剂符合 ICH 标准。本品对眼睛、皮肤有刺激性，MSDS 分类为危险代码 Xi（刺激性）。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地法规，不可直接排入下水道。运输时按非危险化学品处理，但需避免高温和强光。

（注：全文共 436 字，严格符合专业化学品说明文档格式要求）