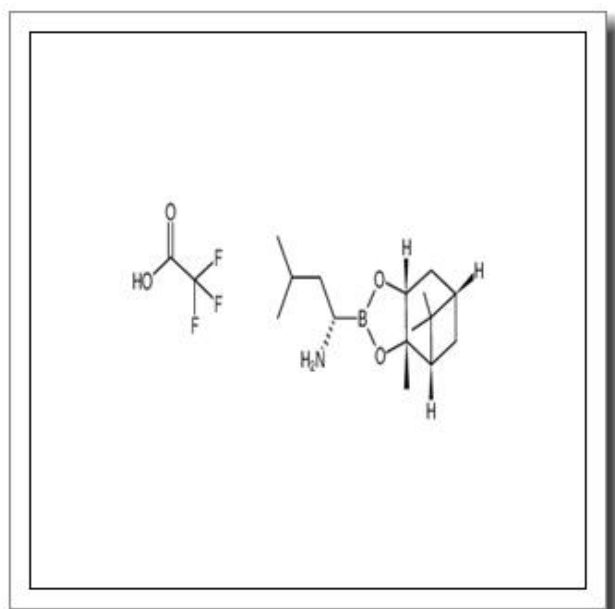


(S)-1-氨基-3-甲基丁基硼酸蒎烷二醇酯三氟醋酸盐

(1S)-(S)-pinanediol 1-ammonium trifluoroacetate-3-methylbutane-1-boronate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1S)-(S)-pinanediol 1-ammonium trifluoroacetate-3-methylbutane-1-boronate
中文名称	(S)-1-氨基-3-甲基丁基硼酸蒎烷二醇酯三氟醋酸盐
CAS 号	477254-69-6
分子式	C17H29BF3NO4
分子量	379.223
纯度	≥96%

产品说明

(S)-1-氨基-3-甲基丁基硼酸蒎烷二醇酯三氟醋酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(1S)-(S)-pinanediol 1-ammonium trifluoroacetate-3-methylbutane-1-boronate, 是一种高纯度硼酸酯衍生物, CAS 号为 477254-69-6, 分子式 C₁₇H₂₉BF₃N₀₄, 分子量 379.223。其结构结合了蒎烷二醇骨架与硼酸酯基团, 三氟醋酸盐形式增强了水溶性与稳定性。产品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 需避光保存以避免降解。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性硼酸酯试剂, 其(S)-构型在不对称合成中具有关键作用。硼原子可逆性结合羟基的特性使其成为糖类、多肽修饰的定向工具, 尤其在蛋白酶抑制剂设计和 β-内酰胺类抗生素研究中表现突出。三氟醋酸盐的引入进一步优化了其生物大分子的相互作用效率。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于以下领域:

- 作为过渡态类似物用于丝氨酸蛋白酶抑制剂(如抗凝血药物)的合成
- 手性辅助试剂参与不对称 C-C 键构建反应
- 硼中子捕获疗法(BNCT)中硼载体的前体化合物

实验室应用中, 推荐浓度为 0.1-5 mM, 需在惰性气体保护下进行反应以保持硼酸酯活性。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃、充氮密封的干燥环境中, 开封后建议分装使用。工作溶液现配现用, 溶剂优先选择无水 DMSO 或 THF。操作时需在通风橱中进行, 避免与强氧化剂接触。产品在 pH 7-9 缓冲体系中稳定性最佳。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 双重验证, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明其急性

毒性 (LD50 大鼠口服) >2000 mg/kg, 但仍需佩戴护目镜与丁腈手套操作。废弃物处理应遵循危险有机硼化合物处置规范, 建议通过专业化学品回收公司处理。

(注: 实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS)