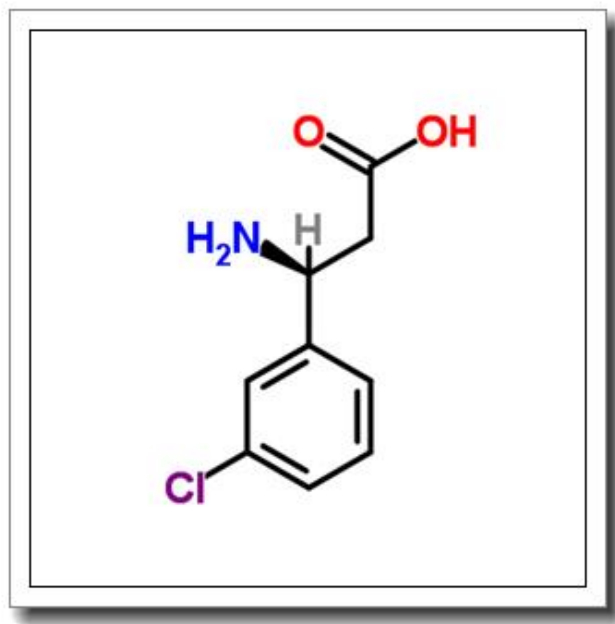


(S)-3-(3-氯苯基)-beta-丙氨酸

(3S)-3-amino-3-(3-chlorophenyl)propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3S)-3-amino-3-(3-chlorophenyl)propanoic acid
中文名称	(S)-3-(3-氯苯基)-beta-丙氨酸
CAS 号	774178-18-6
分子式	C ₉ H ₁₀ ClN ₂ O ₂
分子量	199.634
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(3S)-3-amino-3-(3-chlorophenyl)propanoic acid, 中文名称为(S)-3-(3-氯苯基)-beta-丙氨酸, 是一种手性有机化合物, CAS 号为 774178-18-6。其分子式为 C₉H₁₀ClN₂O₂, 分子量为 199.634, 纯度 ≥96%。该化合物属于 β-氨基酸衍生物, 具有一个手性中心 (S 构型) 和一个 3-氯苯基取代基, 结构特征使其在生物化学和药物化学领域具有独特价值。其白色至类白色结晶粉末形态, 易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、DMSO), 微溶于水, 需在特定 pH 条件下优化溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 β-氨基酸的衍生物, 该化合物可通过模拟天然氨基酸结构参与酶抑制或受体调节。3-氯苯基的引入增强了其疏水性和靶向性, 而手性中心则赋予其对生物系统立体选择性的相互作用能力。这类结构常见于神经递质类似物或酶底物设计中, 尤其在 GABA 受体调节剂和抗菌肽模拟物的研究中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体和生化试剂的合成。在药物研发中, 可作为构建块用于蛋白酶抑制剂、抗抑郁剂或抗菌药物的手性前体。此外, 在不对称合成和催化反应中, 其手性特征可用于诱导立体选择性反应。研究领域还涉及代谢通路分析和分子探针标记, 例如用于研究氯代芳香族化合物在细胞内的代谢行为。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 干燥环境中, 避免光照和湿度。长期储存需充惰性气体保护。使用时需在惰性气氛 (如氮气) 下操作, 防止氧化。溶解推荐使用预冷的 DMSO 或缓冲体系 (pH 7-8), 并现配现用以避免降解。实验人员应穿戴防护装备 (手套、护目镜), 在通风橱中处理粉末状产品。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。MS 和 NMR 谱图确保结构准确性。安全数据表明, 其急性毒性 (LD₅₀) 为中等 (大鼠口服 >500 mg/kg),

但可能对眼睛和呼吸道产生刺激。废弃物处理需遵循有机卤化物规范，不可直接排入下水道。提供材料安全数据表（MSDS）备查，紧急接触时需用大量清水冲洗并就医。