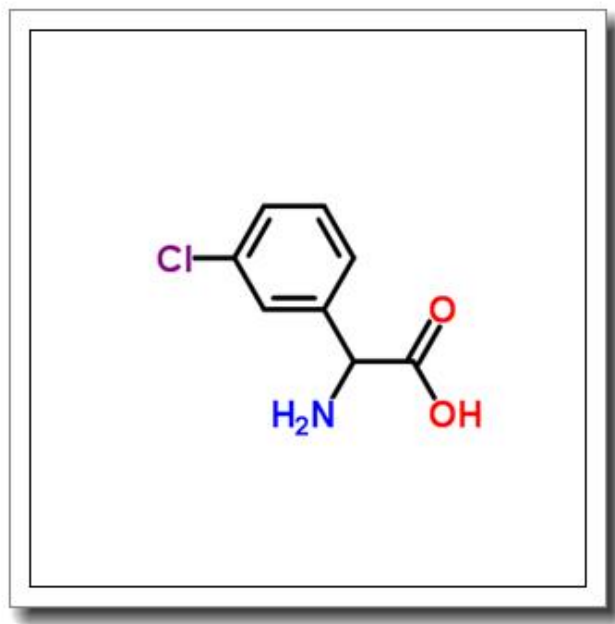


(S)-3-氯苯甘氨酸

(2S)-2-amino-2-(3-chlorophenyl)acetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-2-amino-2-(3-chlorophenyl)acetic acid
中文名称	(S)-3-氯苯甘氨酸
CAS 号	119565-00-3
分子式	C ₈ H ₈ ClN ₂ O ₂
分子量	185.608
纯度	≥96%

产品说明

(S)-3-氯苯甘氨酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(S)-3-氯苯甘氨酸（化学名称：(2S)-2-amino-2-(3-chlorophenyl)acetic acid）是一种手性非天然氨基酸衍生物，CAS 号为 119565-00-3，分子式 $C_8H_8ClNO_2$ ，分子量 185.608。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有光学活性（S 构型）。其结构中 3-氯苯基与甘氨酸骨架的结合赋予其独特的空间位阻和电子效应，在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甘氨酸的氯代衍生物，该化合物可通过竞争性抑制或结构模拟参与酶促反应，尤其适用于手性药物中间体的合成。其氯原子增强了分子疏水性，而氨基和羧基则为后续衍生化（如肽键形成或金属配位）提供了活性位点。在生物体系中，此类结构常作为 β -内酰胺类抗生素或 DPP-4 抑制剂的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

- （1）医药研发：用于合成手性药物（如降糖药西格列汀）的中间体；
- （2）不对称催化：作为配体修饰金属催化剂，提高立体选择性；
- （3）生化研究：模拟天然氨基酸研究酶底物特异性；
- （4）材料科学：构建功能性高分子单体。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8°C（长期）或室温（短期）。使用前需平衡至室温，避免反复冻融。溶解性测试表明易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），水溶性较低（需调节 pH 至碱性）。操作时建议在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 测定纯度，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MS 和 NMR 确保结构确证。安全

数据: 急性毒性 (口服, 大鼠) LD₅₀>500 mg/kg, 对眼睛和皮肤有轻微刺激性。应
急处理: 接触后立即用大量清水冲洗, 就医。废弃物按危险化学品法规处置。

注: 本产品仅限科研用途, 不可用于临床或食品领域。具体实验方案需结合文献优化条件。