

(S)-(4-(2-((叔丁氧羰基)氨基)-3-甲氧基-3-酮)丙基)苯硼酸

[4-[(2S)-3-methoxy-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-3-oxopropyl]phenyl]boronic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	[4-[(2S)-3-methoxy-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-3-oxopropyl]phenyl]boronic acid
中文名称	(S)-(4-(2-((叔丁氧羰基)氨基)-3-甲氧基-3-酮)丙基)苯硼酸
CAS 号	224824-22-0
分子式	C ₁₅ H ₂₂ BN ₀₆
分子量	323.149
纯度	≥96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-(4-(2-((叔丁氧羰基)氨基)-3-甲氧基-3-酮)丙基)苯硼酸 (化学名称: [4-[(2S)-3-methoxy-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]-3-oxopropyl]phenyl]boronic acid) 是一种有机硼酸衍生物, CAS 号为 224824-22-0, 分子式为 C₁₅H₂₂BN₀O₆, 分子量为 323.149。该化合物具有手性中心 (S 构型), 结构中包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团、甲氧基羰基以及苯硼酸基团, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。其纯度通常不低于 96%, 适合用于高要求的科研与工业应用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸类试剂, 能够通过硼酸与二醇或羟基化合物的可逆共价结合, 参与 Suzuki-Miyaura 偶联反应等关键有机转化。其手性结构和 Boc 保护基团使其成为合成手性药物或生物活性分子的重要中间体。此外, 苯硼酸基团在糖类识别、蛋白质标记和传感器开发等领域也有广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

(S)-(4-(2-((叔丁氧羰基)氨基)-3-甲氧基-3-酮)丙基)苯硼酸主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为手性砌块, 用于合成蛋白酶抑制剂、抗肿瘤药物等靶向分子。
- 有机合成: 参与过渡金属催化的偶联反应, 构建复杂芳环结构。
- 化学生物学: 用于糖蛋白标记或生物传感器设计, 研究糖-蛋白质相互作用。

4. 储存条件与使用建议

该化合物需避光、密封保存于 -20° C 或更低的干燥环境中, 以防止硼酸基团水解或 Boc 保护基脱落。使用时建议在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强氧化剂或酸碱物质接触。溶解时可选用无水二甲基亚砜 (DMSO) 或四氢呋喃 (THF) 等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 $\geq 96\%$ 。使用时需穿戴防护装备（手套、护目镜等），避免吸入或皮肤接触。若意外接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。安全数据表（SDS）可进一步提供毒理学和应急处理信息。