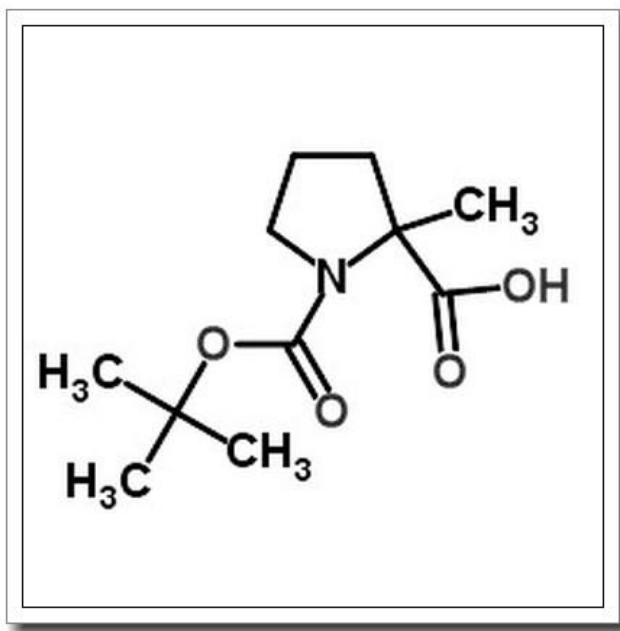


1-Boc-2-甲基-DL-脯氨酸

2-methyl-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-methyl-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	1-Boc-2-甲基-DL-脯氨酸
CAS 号	203869-80-1
分子式	C ₁₁ H ₁₉ N ₀₄
分子量	229.273
纯度	>96%

产品说明

1-Boc-2-甲基-DL-脯氨酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-methyl-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid, 中文名 1-Boc-2-甲基-DL-脯氨酸, CAS 号为 203869-80-1, 分子式为 C₁₁H₁₉N₀₄, 分子量 229.273。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%, 具有脯氨酸骨架结构, 其 α -碳位甲基取代及 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团赋予其独特空间位阻和化学稳定性, 易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为脯氨酸衍生物, 本品在肽合成中具有关键作用。Boc 保护基可选择性脱除, 避免 α -氨基在缩合反应中发生副反应; 2 位甲基修饰能增强肽链刚性, 影响二级结构形成, 广泛应用于构效关系研究。其 DL-构型混合物适用于非立体选择性合成场景, 是药物研发中构建特殊肽类分子 (如蛋白酶抑制剂) 的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域:

- 多肽药物开发: 作为非天然氨基酸砌块, 用于引入甲基化修饰, 改善肽类药物的代谢稳定性
- 有机合成: 作为手性助剂或催化剂配体, 参与不对称合成反应
- 生物标记物研究: 通过同位素标记衍生物追踪蛋白质折叠动力学
- 材料科学: 制备功能化高分子材料的单体组分

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于-20℃干燥避光环境, 惰性气体保护可延长稳定性。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。使用前需恢复至室温平衡, 称量环境湿度应<60%。反应体系中需注意 Boc 基团对强酸 (如 TFA) 的敏感性, 建议在碱性缓冲条件下进行后续衍生化。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 检测纯度, 符合 USP 级标准。MS 及 ¹H NMR 确保结构准确性。安全数据: LD₅₀ (大鼠口服) >2000 mg/kg, 属低毒类物质, 但接触时仍需佩戴防护手套/眼镜。若吸入粉尘, 应立即转移至通风处; 意外摄入需就医并携带本品 CAS 号信息。废弃物处置应遵守当地有机化学品处理法规。

(注: 本说明基于当前研究数据, 具体应用需结合实验条件优化。)