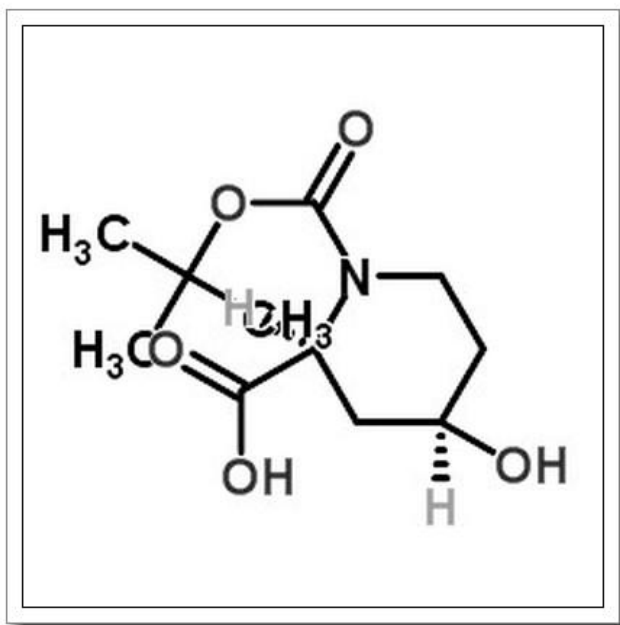


(2S,4R)-4-羟基哌啶-1,2-二羧酸 1-叔丁酯

(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-hydroxyhexahydro-2-pyridinecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-hydroxyhexahydro-2-pyridinecarboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-4-羟基哌啶-1, 2-二羧酸 1-叔丁酯
CAS 号	955016-25-8
分子式	C ₁₁ H ₁₉ N ₀₅
分子量	245. 272
纯度	>96%

产品说明

(2S, 4R)-1-(叔丁氧羰基)-4-羟基六氢-2-吡啶甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-hydroxyhexahydro-2-pyridinecarboxylic acid，分子式 C₁₁H₁₉N₁O₅，分子量 245.272，CAS 登记号 955016-25-8。其结构中同时含有叔丁氧羰基（Boc）保护基团、羟基及羧酸官能团，具有明确的手性中心（2S, 4R 构型）。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 128-132° C，易溶于极性有机溶剂如甲醇、二甲基亚砜，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吡啶羧酸衍生物的重要中间体，其 Boc 保护基可选择性脱除，羟基与羧基位点可进一步功能化修饰。在肽类模拟物和酶抑制剂设计中，其刚性六元环结构与手性特征能显著提升目标分子的立体选择性及生物活性，尤其适用于构建蛋白酶靶向药物的核心骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键合成砌块，广泛应用于以下领域：

- 药物研发：用于 HIV 蛋白酶抑制剂、抗肿瘤药物及神经退行性疾病治疗剂的合成。
- 不对称催化：作为手性配体或催化剂前体参与立体选择性反应。
- 肽模拟物：通过羧基与氨基的缩合反应构建非天然氨基酸片段。
- 生化探针：标记后用于酶活性位点或受体结合机制研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封容器中，置于-20° C 干燥避光环境，惰性气体（如氮气）保护可延长稳定性。开封后建议分装使用，避免反复冻融。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF，若需水相反应，建议先以少量有机溶剂预溶后缓冲液稀释。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、旋光度 ($[\alpha]_{D20}$) 及水分含量 (Karl Fischer 法)。本品对眼睛和呼吸道有轻微刺激性, 操作时需佩戴护目镜及防尘口罩。若不慎接触皮肤, 立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合有机危险化学品规范。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。)