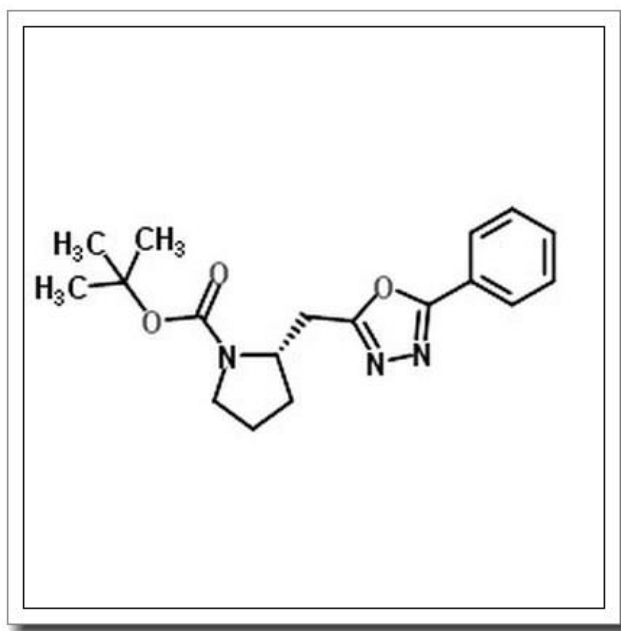


2-Methyl-2-propanyl (2S)-2-[(5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)methyl]-1-pyrrolidinecarboxylate

2-Methyl-2-propanyl (2S)-2-[(5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)methyl]-1-pyrrolidinecarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl (2S)-2-[(5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)methyl]-1-pyrrolidinecarboxylate
中文名称	2-Methyl-2-propanyl (2S)-2-[(5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)methyl]-1-pyrrolidinecarboxylate
CAS 号	483314-82-5
分子式	C18H23N3O3
分子量	329.393

纯度	>96%
----	------

产品说明

2-Methyl-2-propanyl (2S)-2-[(5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)methyl]-1-pyrrolidinecarboxylate 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-Methyl-2-propanyl (2S)-2-[(5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)methyl]-1-pyrrolidinecarboxylate，CAS 号为 483314-82-5，分子式 C₁₈H₂₃N₃O₃，分子量 329.393。其结构中包含 1,3,4-噁二唑环和吡咯烷羧酸酯基团，具有显著的立体选择性和分子刚性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体，在酶抑制和受体调节研究中表现出特异性结合能力。其噁二唑环可模拟肽键构象，常用于设计蛋白酶抑制剂或信号通路调节剂。吡咯烷羧酸酯部分则增强了细胞膜穿透性，使其在神经药理学和肿瘤靶向治疗领域具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于激酶抑制剂和 GPCR 配体的结构优化，特别针对阿尔茨海默症相关 β-分泌酶 (BACE1) 的抑制剂开发。
- 3.2 农药化学：作为新型杀虫剂的前体化合物，作用于昆虫神经系统烟碱型乙酰胆碱受体。
- 3.3 材料科学：在液晶材料中作为手性掺杂剂，调节介晶相行为。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照和湿度。长期储存建议充入惰性气体保护。
- 4.2 溶解性：推荐使用 DMSO 或乙醇溶解（溶解度分别为 25 mg/mL 和 8 mg/mL），水溶液需现配现用。
- 4.3 操作：建议在通风橱中佩戴防化手套和护目镜，避免吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准：通过 ^1H NMR、 ^{13}C NMR 和质谱进行结构确证，残留溶剂符合 ICH Q3C 指南。

5.2 安全数据：急性毒性（LD₅₀ 大鼠口服）>2000 mg/kg，属于低毒类物质。但可能引起眼睛和皮肤刺激，接触后需立即用大量清水冲洗。

5.3 废弃物处理：按危险化学品处置规范，交由专业机构处理。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版 MSDS 并执行风险评估。