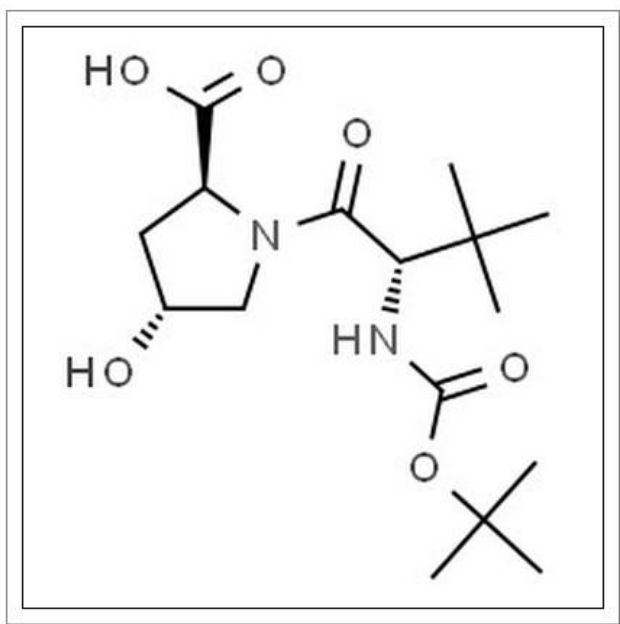


(2S,4R)-1-((S)-2-((tert-butoxycarbonyl)amino)-3,3-dimethylbutanoyl)-4-hydroxypyrrolidine-2-carboxylic acid

(2S, 4R)-1-((S)-2-((tert-butoxycarbonyl)amino)-3, 3-dimethylbutanoyl)-4-hydroxypyrrolidine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-1-((S)-2-((tert-butoxycarbonyl)amino)-3, 3-dimethylbutanoyl)-4-hydroxypyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-1-((S)-2-((tert-butoxycarbonyl)amino)-3, 3-dimethylbutanoyl)-4-hydroxypyrrolidine-2-

	carboxylicacid
CAS 号	630421-46-4
分子式	C ₁₆ H ₂₈ N ₂ O ₆
分子量	344.403
纯度	>96%

产品说明

(2S, 4R) -1- ((S) -2- ((叔丁氧羰基) 氨基) -3, 3-二甲基丁酰基) -4-羟基吡咯烷-2-羧酸产品说明书

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- ((S) -2- ((叔丁氧羰基) 氨基) -3, 3-二甲基丁酰基) -4-羟基吡咯烷-2-羧酸，CAS 号为 630421-46-4，分子式 C₁₆H₂₈N₂O₆，分子量 344. 403。其结构中含有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团、羟基吡咯烷环及羧酸官能团，纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），在酸性或碱性条件下可能发生水解反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是脯氨酸衍生物，其 Boc 保护基团可选择性脱除，广泛应用于多肽合成中作为关键中间体。4-羟基吡咯烷结构能增强肽链的刚性，改善靶标结合特异性，在构象限制性肽类药物的设计中具有重要价值。此外，其手性中心 (2S, 4R) 的立体构型对生物活性具有显著影响，常用于蛋白酶抑制剂或 GPCR 配体的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

作为高端医药中间体，主要用于以下领域：

- (1) 抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）的合成
- (2) 抗癌肽类化合物的结构修饰
- (3) 神经退行性疾病研究中的肽模拟物开发
- (4) 固相多肽合成 (SPPS) 中作为构象限制性氨基酸单元

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（如氩气）保护可延长稳定性。使用时需在干燥氮气环境下操作，避免反复冻融。建议现配现用，若配制成溶液，需在 -20℃ 保存并于 48 小时内使用。与强氧化剂、酸碱物质需隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS)、核磁共振 (NMR) 及 HPLC 三重验证，符合药物研发级标准。

操作时需佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中进行。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。安全数据表（SDS）显示其急性毒性类别为 4（低毒），但吸入或摄入可能引起黏膜刺激。废弃物处置需遵循当地危险化学品法规。

注：本说明仅限专业研究人员参考，具体应用需根据实验方案调整。