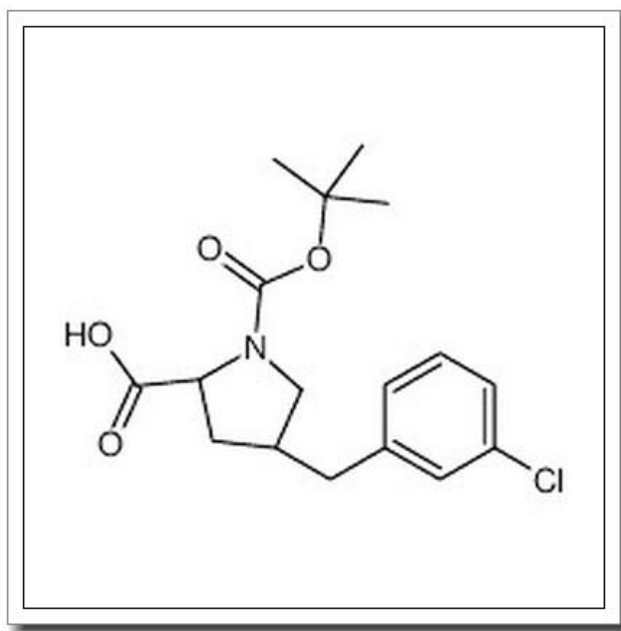


(2S,4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(3-chlorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid

(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(3-chlorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(3-chlorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(3-chlorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid
CAS 号	959576-36-4
分子式	C ₁₇ H ₂₂ ClN ₁ O ₄
分子量	339.814
纯度	>96%

产品说明

(2S, 4R) -1- (叔丁氧羰基) -4- (3-氯苄基) 吡咯烷-2-羧酸产品说明书

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 (2S, 4R) -1- (tert-Butoxycarbonyl) -4- (3-chlorobenzyl) pyrrolidine-2-carboxylic acid, CAS 号 959576-36-4, 分子式 C₁₇H₂₂ClN₁O₄, 分子量 339.814。结构中含吡咯烷环、叔丁氧羰基 (Boc) 保护基及 3-氯苄基取代基，赋予其手性中心和特定空间构型。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为脯氨酸衍生物，其 Boc 保护基可选择性脱除，适用于肽链延伸或药物分子构建。3-氯苄基的引入增强了疏水性，常用于调节化合物细胞膜穿透性。该分子是合成蛋白酶抑制剂、GPCR 靶向药物的重要中间体，尤其在抗肿瘤和抗病毒先导化合物开发中具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

(1) 医药研发：用于构建含吡咯烷结构的活性分子，如 HCV NS3/4A 蛋白酶抑制剂类似物。

(2) 不对称合成：作为手性辅助试剂参与立体选择性反应。

(3) 生化探针：标记或修饰生物大分子以研究蛋白质相互作用。

(4) 材料科学：合成功能性高分子单体的前体。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20℃、避光、干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议充氮密封保存。使用前需恢复至室温以避免吸湿，称量时需在通风橱操作。建议以 DMSO 配制母液 (浓度 ≤50 mM)，分装后 -80℃ 长期保存，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包括熔点 (实测值 198-202℃)、旋光度 ($[\alpha]_{D20}$ +15° 至 +18°)、HPLC 纯度及水分含量 (≤0.5%)。安全数据：急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >2000

mg/kg, 但可能引起眼睛和皮肤刺激。操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套, 若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物按危险化学品规范处置。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用需进一步实验验证。