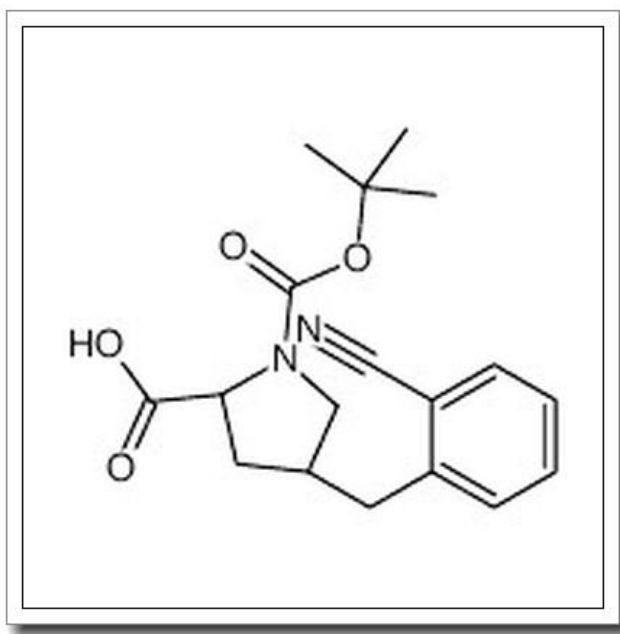


(2S,4R)-4-[(2-cyanophenyl)methyl]-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid

(2S, 4R)-4-[(2-cyanophenyl)methyl]-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-4-[(2-cyanophenyl)methyl]-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-4-[(2-cyanophenyl)methyl]-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid
CAS 号	959573-33-2

分子式	C ₁₈ H ₂₂ N ₂ O ₄
分子量	330.378
纯度	>96%

产品说明

(2S, 4R) -4-[(2-氰基苯基)甲基]-1-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]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) -4-[(2-氰基苯基)甲基]-1-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]吡咯烷-2-羧酸，CAS 号 959573-33-2，分子式 C₁₈H₂₂N₂O₄，分子量 330.378。其结构中包含吡咯烷羧酸骨架、氰基苯甲基取代基及叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团，具有明确的手性中心 (2S, 4R 构型)。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合有机合成中间体的高标准要求。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是脯氨酸衍生物类手性砌块，其 Boc 保护基赋予其良好的稳定性，而氰基苯甲基侧链可参与亲核反应。作为多肽模拟物设计的核心结构，它能够通过构象限制调节生物活性，在蛋白酶抑制剂开发中具有特殊价值。其立体选择性特征对药物分子的靶点结合效率至关重要。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于创新药物研发领域：

- 作为小分子抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）的关键中间体
- 用于构建含脯氨酸结构的肽类似物
- 在不对称合成中作为手性辅助试剂
- 功能化后可开发为组织蛋白酶或激酶抑制剂

4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中，建议在 -20℃ 干燥环境下保存，避免反复冻融。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，溶解性测试显示易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，水溶性较差。建议现配现用，剩余溶液需在 -80℃ 短期保存。

5. 质量控制与安全信息

通过核磁共振 (1H/13C NMR)、质谱 (HRMS) 及手性 HPLC 进行结构确证。常规检

测包括残留溶剂（GC）、水分（Karl Fischer）及重金属含量（ICP-MS）。

安全警示：

- 吞食有害（H302）
- 皮肤接触可能致敏（H317）
- 操作时需佩戴防护手套/眼镜，在通风橱中进行
- 废弃物处置应符合危险化学品管理规范

（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）