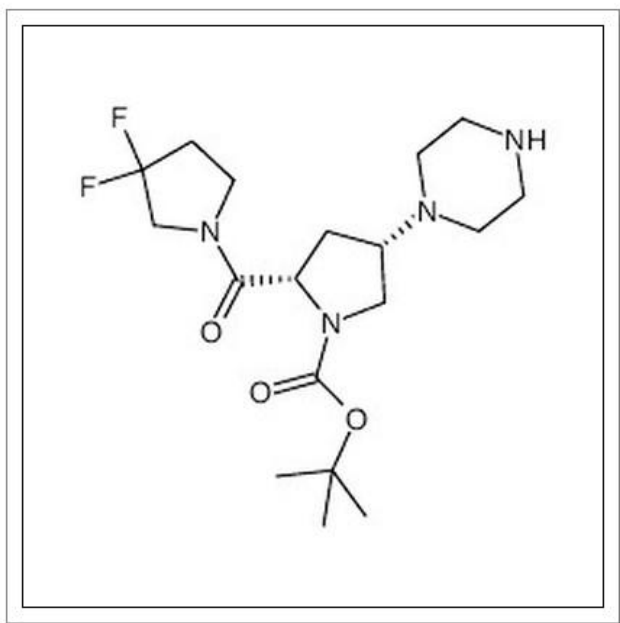


# (2S,4S)-1-BOC-2-(3,3-二氟吡咯烷-1-羰基)-4-(1-哌嗪基)吡咯烷

*(2S, 4S)-2-(3, 3-difluoropyrrolidine-1-carbonyl)-4-piperazin-1-ylpyrrolidine-1-carboxylic acid tert-butyl ester*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4S)-2-(3, 3-difluoropyrrolidine-1-carbonyl)-4-piperazin-1-ylpyrrolidine-1-carboxylic acid tert-butyl ester
中文名称	(2S, 4S)-1-BOC-2-(3, 3-二氟吡咯烷-1-羰基)-4-(1-哌嗪基)吡咯烷
CAS 号	869489-00-9
分子式	C <sub>18</sub> H <sub>30</sub> F <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>
分子量	388. 453
纯度	>96%

## 产品说明

### (2S, 4S)-1-BOC-2-(3, 3-二氟吡咯烷-1-羰基)-4-(1-哌嗪基)吡咯烷产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(2S, 4S)-2-(3, 3-二氟吡咯烷-1-羰基)-4-哌嗪-1-基吡咯烷-1-羧酸叔丁酯, CAS 号为 869489-00-9, 分子式为 C<sub>18</sub>H<sub>30</sub>F<sub>2</sub>N<sub>4</sub>O<sub>3</sub>, 分子量为 388.453。该化合物为白色至类白色固体, 纯度高于 96%, 具有明确的手性中心(2S, 4S 构型), 结构中含有二氟吡咯烷、哌嗪及 BOC 保护基团, 表现出良好的化学稳定性和溶解性(适用于有机溶剂如 DMSO、甲醇等)。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为一类含氟哌嗪类衍生物, 该化合物在药物化学中具有重要价值。其结构中的哌嗪基团可增强与生物靶点的相互作用, 而二氟修饰能改善代谢稳定性和脂溶性。BOC 保护基团则为后续脱保护反应提供了灵活性, 使其成为合成复杂生物活性分子(如蛋白酶抑制剂或 GPCR 配体)的关键中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为小分子药物设计的砌块, 用于构建抗肿瘤、抗病毒或中枢神经系统药物的核心结构。
- 在激酶抑制剂或蛋白酶体抑制剂的优化中, 用于结构-活性关系(SAR)研究。
- 作为同位素标记或荧光标记的前体, 用于生物探针开发。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光干燥储存, 长期保存需置于惰性气体(如氩气)环境中。使用时需恢复至室温并避免反复冻融。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液需现配现用。操作应在通风橱中进行, 并佩戴防护手套及护目镜。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度>96%, MS 和 NMR 确保结构准确。安全信息提示:

- 可能对眼睛、皮肤有刺激性, 接触后立即用大量清水冲洗。

- 避免吸入粉尘，操作时需配备防尘口罩。
- 废弃物应按照危险化学品规范处置。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合研究目的进一步优化。