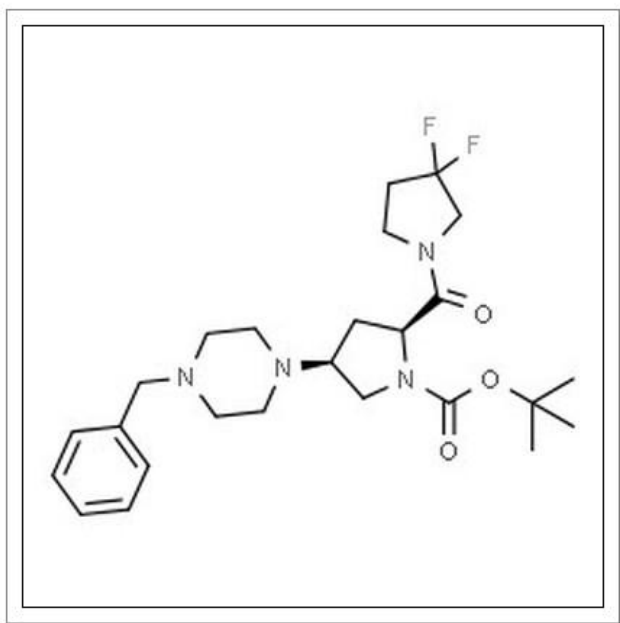


(2S,4S)-1-BOC-2-(3,3-二氟吡咯烷-1-羰基)-4-(4-苄基-1-哌嗪基)吡咯烷

(2S, 4S)-1-Boc-4-(4-benzyl-1-piperazinyl)-2-(3, 3-difluoropyrrolidine-1-carbonyl)pyrrolidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4S)-1-Boc-4-(4-benzyl-1-piperazinyl)-2-(3, 3-difluoropyrrolidine-1-carbonyl)pyrrolidine
中文名称	(2S, 4S)-1-BOC-2-(3, 3-二氟吡咯烷-1-羰基)-4-(4-苄基-1-哌嗪基)吡咯烷
CAS 号	1864002-93-6
分子式	C ₂₅ H ₃₆ F ₂ N ₄ O ₃
分子量	478. 58
纯度	>96%

产品说明

(2S, 4S)-1-Boc-4-(4-benzyl-1-piperazinyl)-2-(3, 3-difluoropyrrolidine-1-carbonyl)pyrrolidine 产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色固体粉末，化学名称为(2S, 4S)-1-BOC-2-(3, 3-二氟吡咯烷-1-羰基)-4-(4-苄基-1-哌嗪基)吡咯烷，CAS 号为 1864002-93-6，分子式为 C₂₅H₃₆F₂N₄O₃，分子量为 478.58。其结构中包含 Boc 保护基、二氟吡咯烷羰基以及苄基哌嗪基团，具有显著的手性中心（2S, 4S 构型），纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%。该化合物在有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）、甲醇中具有良好溶解性，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物，该化合物可通过其哌嗪基团参与配体-受体相互作用，而二氟吡咯烷羰基结构可增强代谢稳定性。Boc 保护基的存在使其成为多肽或小分子药物合成中的关键中间体，尤其在构建含氮杂环的靶向分子中具有重要价值。其手性结构对生物活性具有潜在选择性影响，适用于立体特异性药物开发。

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：

- 作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的合成前体
- 用于构建抗肿瘤或抗炎药物的核心骨架
- 在 PROTAC（蛋白降解靶向嵌合体）技术中作为连接子或配体组分
- 手性药物开发中的中间体

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光干燥储存，长期保存需充惰性气体保护。使用时需平衡至室温后开封，避免反复冻融。溶解推荐使用无水 DMSO，配制溶液建议现配现用。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱严格质检，批号关联完整分析证书（COA）。安全信息如下：

- 危险代码：H302（吞咽有害）
- 防护措施：佩戴防护手套、护目镜及实验服
- 废弃物处理：按有机有害废物规范处置
- 紧急处理：接触皮肤后立即用大量清水冲洗，就医咨询

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床或人体实验。具体应用需结合进一步药理学评估。