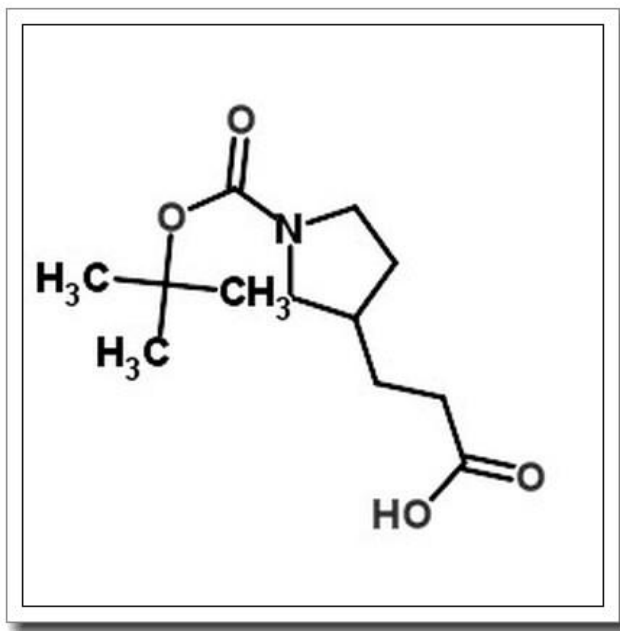


3-(1-(叔丁氧羰基)吡咯烷-3-基)丙酸

3-[1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidin-3-yl]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidin-3-yl]propanoic acid
中文名称	3-(1-(叔丁氧羰基)吡咯烷-3-基)丙酸
CAS 号	885271-17-0
分子式	C ₁₂ H ₂₁ N ₁ O ₄
分子量	243.299
纯度	>96%

产品说明

3-[1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidin-3-yl]propanoic acid (3-(1-(叔丁氧羰基)吡咯烷-3-基)丙酸) 产品说明书

产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-[1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidin-3-yl]propanoic acid, CAS 号为 885271-17-0, 分子式 C₁₂H₂₁N₀₄, 分子量 243.299。其结构中包含吡咯烷环和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团，羧酸基团赋予其水溶性和反应活性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 98-102° C, 易溶于有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇。

生物化学功能与重要性

该化合物是重要的医药中间体，Boc 保护基在肽合成中可选择性脱保护，吡咯烷结构常见于生物活性分子骨架。其羧酸基团可通过缩合反应形成酰胺键，广泛应用于蛋白酶抑制剂、GPCR 配体等药物的结构修饰。在 PROTAC 技术中可作为连接器 (linker) 组成部分，调控分子降解效率。

主要应用领域与具体用途

1. 多肽合成：作为 Boc 保护的氨基酸衍生物，用于固相肽合成 (SPPS)
2. 小分子药物开发：构建含吡咯烷结构的候选化合物，如 NK1 受体拮抗剂
3. PROTAC 分子设计：连接 E3 泛素连接酶配体与靶蛋白配体的关键构件
4. 生化研究：用于酶底物模拟物或抑制剂的结构优化

储存条件与使用建议

储存于 -20° C 干燥环境中，充氮密封避光保存，有效期 36 个月。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。建议工作浓度用无水 DMSO 配制 (≤50mM)，水溶液需现配现用。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

质量控制与安全信息

批次纯度经 HPLC (254nm) 和 LC-MS 双重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 显示该品对眼睛和呼吸道有轻微刺激性，操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。废弃物

处理需符合当地危险化学品管理条例。急性毒性数据（大鼠口服 LD50）> 2000mg/kg，属于低毒类化合物。