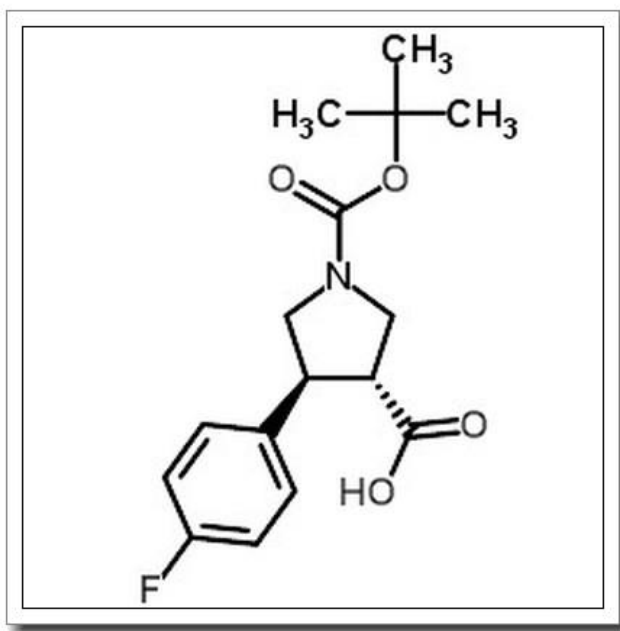


(3R,4S)-4-(4-Fluorophenyl)-1-{[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl}-3-pyrrolidinecarboxylic acid

(3R, 4S)-4-(4-Fluorophenyl)-1-{[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl}-3-pyrrolidinecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3R, 4S)-4-(4-Fluorophenyl)-1-{[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl}-3-pyrrolidinecarboxylic acid
中文名称	(3R, 4S)-4-(4-Fluorophenyl)-1-{[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl}-3-pyrrolidinecarboxylic acid
CAS 号	1218764-11-4
分子式	C ₁₆ H ₂₀ FN ₀₄
分子量	309.333
纯度	>96%

产品说明

(3R, 4S) -4- (4-氟苯基) -1- {[(2-甲基-2-丙烷基) 氧基] 羰基} -3-吡咯烷甲酸产品说明书

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 (3R, 4S) -4- (4-氟苯基) -1- {[(2-甲基-2-丙烷基) 氧基] 羰基} -3-吡咯烷甲酸，CAS 号 1218764-11-4，分子式 C₁₆H₂₀FNO₄，分子量 309.333。其结构中含氟苯基和吡咯烷羧酸骨架，并具有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性吡咯烷衍生物，该分子是合成蛋白酶抑制剂和神经递质调节剂的关键中间体。其立体构型 (3R, 4S) 对生物活性具有显著影响，尤其适用于靶向 G 蛋白偶联受体的药物开发。氟原子的引入增强了化合物的代谢稳定性及膜穿透能力，在药物化学中广泛用于优化先导化合物的药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 医药研发：作为 HIV 蛋白酶抑制剂或抗抑郁药物的合成砌块。
- 不对称催化：作为手性配体或催化剂的前体。
- 学术研究：用于研究氟代芳香族化合物对酶活性的调控机制。

典型用途包括 Boc 保护基的脱保护反应、羧酸官能团的衍生化反应等。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20° C、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装使用以避免吸湿。操作时需在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明，推荐使用无水 DMSO 配制 10-50 mM 母液，现配现用。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度通过 HPLC (C18 柱，乙腈/水梯度洗脱) 和质谱联用技术验证。产品含微

量水分 ($\leq 0.5\%$, 卡尔费休法测定), 使用前建议氮气保护下干燥处理。安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服) > 500 mg/kg, 对皮肤有轻微刺激性。废弃物处置需符合有机氟化合物处理规范, 避免强氧化剂接触。

注: 本说明基于现有实验数据编制, 实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。