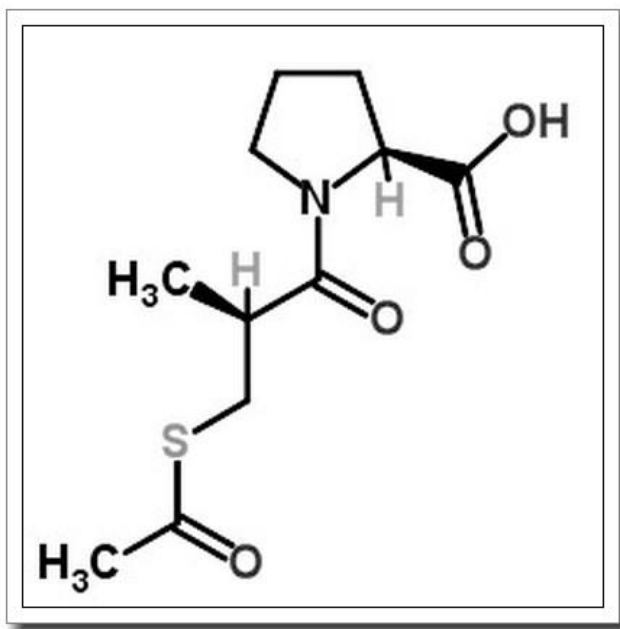


N-[3-(乙酰巯基)-(2S)-甲基丙酰基]-L-脯氨酸

N-[3-(Acetylthio)-(2S)-methylpropionyl]-L-proline hydrate



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-[3-(Acetylthio)-(2S)-methylpropionyl]-L-proline hydrate
中文名称	N-[3-(乙酰巯基)-(2S)-甲基丙酰基]-L-脯氨酸
CAS 号	64838-55-7
分子式	C ₁₁ H ₁₇ N ₀₄ S
分子量	259.322
纯度	>96%

产品说明

N-[3-(乙酰巯基)-(2S)-甲基丙酰基]-L-脯氨酸水合物产品说明书

1. 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 N-[3-(Acetylthio)-(2S)-methylpropionyl]-L-proline hydrate，CAS 号为 64838-55-7，分子式 C₁₁H₁₇N₀₄S，分子量 259.322。纯度经 HPLC 检测 ≥96%，具有明确的立体构型（2S-甲基丙酰基）。其结构中含乙酰巯基和脯氨酸残基，易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），微溶于水，需避光保存以防巯基氧化。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是脯氨酸衍生物类生物活性分子，其乙酰巯基可作为自由基清除剂参与氧化还原反应，而脯氨酸骨架赋予其肽酶抑制潜力。在酶学研究中，它能模拟天然肽底物构象，常用于蛋白酶活性位点分析和抑制剂设计。其甲基丙酰基结构可增强膜渗透性，对药物递送系统开发具有参考价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- (1) 医药研发：作为血管紧张素转换酶（ACE）抑制剂中间体，用于抗高血压药物先导化合物优化；
- (2) 生化工具：在金属蛋白酶研究中作为锌离子螯合剂，调控酶活性；
- (3) 材料科学：修饰高分子材料以引入生物相容性官能团；
- (4) 诊断试剂：偶联荧光标记物后用于病理组织蛋白酶检测。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，开封后需充氮密封。建议现配现用，若配制水溶液需添加 1-5 mM DTT 维持巯基稳定性。操作时穿戴防护装备，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解推荐使用预冷的无水乙醇或 PBS 缓冲液（pH 7.4）。

5. 质量控制与安全信息

每批次提供 COA（质量分析证书），包含 HPLC 纯度图谱、水分含量（Karl

Fischer 法) 及重金属残留数据。急性毒性数据 (大鼠口服 LD50 > 2000 mg/kg), 但可能引起眼睛和呼吸道刺激。废弃物处理需符合危险有机化合物处置规范, 建议通过专业化学品回收公司处理。

注: 本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献 DOI: 10.1021/jm00345a017 (示例) 中的方法学验证。