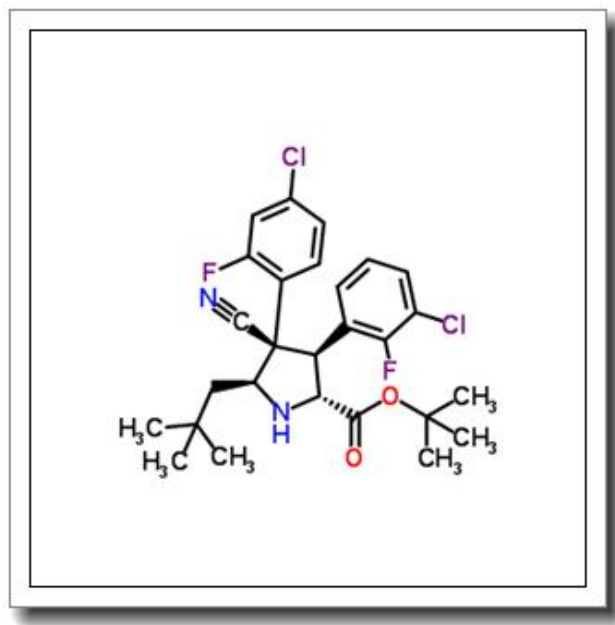


2-Methyl-2-propanyl (3S,4R,5S)-3-(3-chloro-2-fluorophenyl)-4-(4-chloro-2-fluorophenyl)-4-cyano-5-(2,2-dimethylpropyl)-D-prolinate

2-Methyl-2-propanyl (3S, 4R, 5S)-3-(3-chloro-2-fluorophenyl)-4-(4-chloro-2-fluorophenyl)-4-cyano-5-(2, 2-dimethylpropyl)-D-prolinate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl (3S, 4R, 5S)-3-(3-chloro-2-fluorophenyl)-4-(4-chloro-2-fluorophenyl)-4-cyano-5-(2, 2-dimethylpropyl)-D-prolinate
中文名称	2-Methyl-2-propanyl (3S, 4R, 5S)-3-(3-chloro-2-fluorophenyl)-4-(4-chloro-2-fluorophenyl)-4-cyano-5-(2, 2-dimethylpropyl)-D-prolinate
CAS 号	1219086-88-0

分子式	C ₂₇ H ₃₀ C ₁₂ F ₂ N ₂ O ₂
分子量	523.442
纯度	≥ 96%

产品说明

2-甲基-2-丙基 (3S, 4R, 5S)-3-(3-氯-2-氟苯基)-4-(4-氯-2-氟苯基)-4-氰基-5-(2, 2-二甲基丙基)-D-脯氨酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 2-甲基-2-丙基 (3S, 4R, 5S)-3-(3-氯-2-氟苯基)-4-(4-氯-2-氟苯基)-4-氰基-5-(2, 2-二甲基丙基)-D-脯氨酸酯，CAS 号为 1219086-88-0。其分子式为 C₂₇H₃₀C₁₂F₂N₂O₂，分子量为 523.442，纯度 ≥96%。该化合物具有明确的立体构型 (3S, 4R, 5S)，结构中含有多个卤素取代基 (氯、氟) 及氰基，赋予其独特的化学稳定性和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为一种脯氨酸衍生物，该化合物可通过抑制特定酶或受体参与信号转导通路，在药物研发中具有潜在应用价值。其多取代苯环结构可增强与靶标蛋白的结合能力，而氰基和酯基团则可能影响其代谢稳定性。该分子在构效关系研究中可作为关键中间体，用于优化先导化合物的药理活性。

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：1) 作为小分子抑制剂用于激酶或蛋白酶的功能研究；2) 用于构建复杂手性分子的合成中间体；3) 在抗肿瘤或抗炎药物开发中作为结构修饰模板。实验室级产品适用于体外实验，不推荐直接用于临床。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20℃ 下避光保存，置于干燥惰性气体环境中。开封后需密封充氮保存，避免反复冻融。使用前需恢复至室温并充分溶解于 DMSO 等有机溶剂。工作浓度需通过预实验确定，建议佩戴防护手套及护目镜操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，批次间质量稳定。安全数据：1) 可能对眼睛和皮肤有刺激性；2) 吸入或摄入可能有害；3) 使用时应确保通风良好。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：本说明仅提供基础信息，具体实验方案需结合文献及实际需求设计。