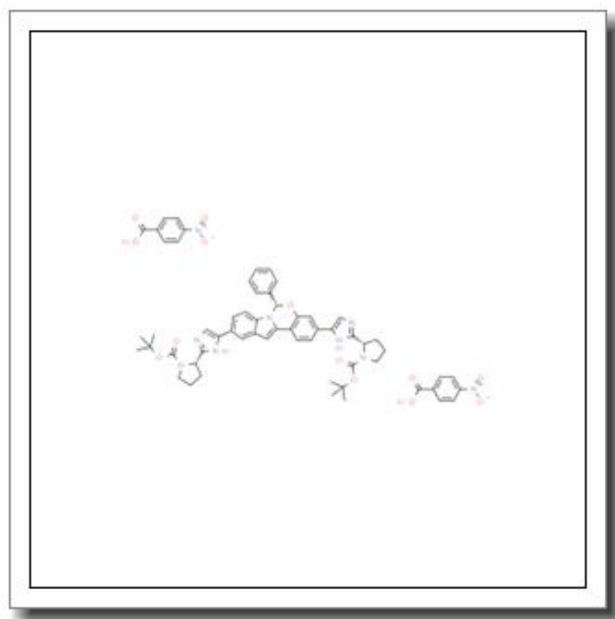


2,2'-((2S,2'S)-(((S)-6-苯基-6H-苯并[5,6][1,3]恶嗪并[3,4-A]吡啶-1,3-二基)双(1H-咪唑-5,2-二基))双(1-(叔丁氧基羰基)吡咯烷-5,2-二基))双(4-硝基苯甲酸酯)

1-Pyrrolidinecarboxylic acid, 2,2'-[[[(6S)-6-phenyl-6H-indolo[1,2-c][1,3]benzoxazine-3,10-diyl]di-1H-imidazole-5,2-diyl]bis-, 1,1'-bis(1,1-dimethylethyl) ester, (2S,2'S)-, 4-nitrobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Pyrrolidinecarboxylic acid, 2,2'-[[[(6S)-6-phenyl-6H-indolo[1,2-c][1,3]benzoxazine-3,10-diyl]di-1H-imidazole-5,2-diyl]bis-, 1,1'-bis(1,1-

	dimethylethyl) ester, (2S, 2' S)-, 4-nitrobenzoate
中文名称	2, 2' - ((2S, 2' S) - ((S) - 6-苯基-6H-苯并[5, 6] [1, 3]恶嗪并[3, 4-A]吡啶-1, 3-二基) 双(1H-咪唑-5, 2-二基)) 双(1-(叔丁氧基羰基)吡咯烷-5, 2-二基)) 双(4-硝基苯甲酸酯)
CAS 号	1585969-26-1
分子式	C59H59N9O13
分子量	1102. 15226
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为高纯度有机化合物，化学名称为 1-Pyrrolidinecarboxylic acid, 2,2'-[[[(6S)-6-phenyl-6H-indolo[1,2-c][1,3]benzoxazine-3,10-diyl]di-1H-imidazole-5,2-diyl]bis-, 1,1'-bis(1,1-dimethylethyl) ester, (2S,2'S)-, 4-nitrobenzoate, 中文名称为 2,2'-((2S,2'S)-(((S)-6-苯基-6H-苯并[5,6][1,3]恶嗪并[3,4-A]吡啶-1,3-二基)双(1H-咪唑-5,2-二基))双(1-(叔丁氧基羰基)吡咯烷-5,2-二基))双(4-硝基苯甲酸酯)。CAS 号为 1585969-26-1, 分子式为 C₅₉H₅₉N₉O₁₃, 分子量为 1102.15226。其结构复杂，含有苯并恶嗪、咪唑和吡咯烷等官能团，具有显著的空间位阻效应和光学活性（S 构型）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的手性中间体或抑制剂前体，其结构中的苯并恶嗪和咪唑环可能赋予其与生物大分子（如酶或受体）特异性结合的能力。4-硝基苯甲酸酯基团增强了其反应活性，而叔丁氧羰基（Boc）保护基团则提高了其化学稳定性。此类结构在药物化学中常用于靶向设计，尤其在抗肿瘤或抗感染药物研发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域，可作为以下用途：

- 新型手性催化剂的合成原料
- 小分子靶向药物的关键中间体
- 生物活性筛选实验中的候选化合物
- 蛋白质-小分子相互作用研究的探针

4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C 下避光保存，干燥环境中密封存放。使用时需恢复至室温并避免反复冻融。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，水溶性较差。实验操作应在通风橱中进行，并佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 \geq 96%，批次间稳定性良好。安全信息如下：

- 可能对眼睛、皮肤及呼吸系统产生刺激
- 避免直接接触，如不慎接触需用大量清水冲洗
- 废弃物应按照有机危险废物处理规范处置
- 具体毒理学数据尚未完全明确，建议在 MSDS 指导下使用