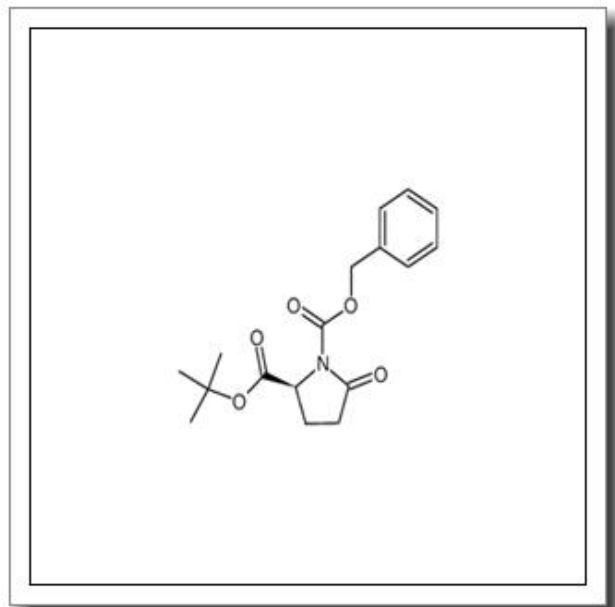


(2S)-5-氧代-1,2-吡咯烷二甲酸 2-叔丁基 1-苄基酯

tert-butyl N-benzyloxycarbonyl-L-pyroglutamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl N-benzyloxycarbonyl-L-pyroglutamate
中文名称	(2S)-5-氧代-1,2-吡咯烷二甲酸 2-叔丁基 1-苄基酯
CAS 号	81470-51-1
分子式	C ₁₇ H ₂₁ N ₀₅
分子量	319.352
纯度	≥96%

产品说明

产品名称: (2S)-5-氧代-1,2-吡咯烷二甲酸 2-叔丁基 1-苄基酯 (tert-butyl N-benzyloxycarbonyl-L-pyroglutamate)

CAS 号: 81470-51-1

分子式: C₁₇H₂₁N₁O₅

分子量: 319.352

纯度: ≥96%

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末, 是一种重要的手性吡咯烷衍生物, 具有特定的立体构型 (2S 构型)。其分子结构中包含叔丁酯基和苄氧羰基保护基团, 化学性质稳定, 易于参与多种有机合成反应。该化合物在极性有机溶剂 (如二氯甲烷、乙酸乙酯) 中溶解性良好, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为 L-焦谷氨酸的衍生物, 该化合物在肽类合成中具有关键作用。其叔丁酯基和苄氧羰基可有效保护羧基和氨基, 避免副反应发生, 同时为后续脱保护提供便利。此外, 其吡咯烷环结构是多种生物活性分子 (如蛋白酶抑制剂和神经递质类似物) 的核心骨架, 在药物研发中具有广泛的应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体和多肽合成领域。具体用途包括:

- 作为手性砌块用于非天然氨基酸的合成。
- 参与固相或液相肽链延伸反应, 构建含有焦谷氨酸的肽段。
- 用于制备蛋白酶抑制剂或抗肿瘤药物前体。
- 在不对称催化反应中作为配体或底物。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐温度为 2-8°C。长期储存建议充入惰性气体 (如氮气) 保护。

使用建议:

- 使用前需恢复至室温并避免吸湿。
- 反应体系中需严格控制水分和酸性条件, 以防叔丁酯基水解。
- 建议在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

质量控制: 通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 同时进行旋光度、熔点 (文献值约 80-82°C) 和核磁共振谱 ($^1\text{H NMR}$) 验证。

安全信息:

- 本品对眼睛和皮肤有轻微刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。
- 如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物需按有机化学品规范处理, 避免环境污染。

注: 本产品仅供科研用途, 不适用于食品、药品或家庭用途。具体应用需结合实验方案调整工艺参数。