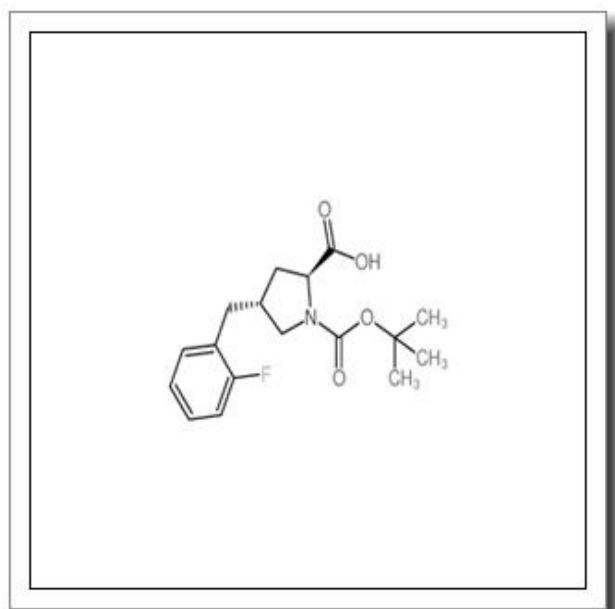


(2S,4R)-1-(反式-叔丁氧基羰基)-4-(2-氟苄基)吡咯-2-羧酸

(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(2-fluorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(2-fluorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-1-(反式-叔丁氧基羰基)-4-(2-氟苄基)吡咯-2-羧酸
CAS 号	959579-52-3
分子式	C ₁₇ H ₂₂ FN ₁ O ₄
分子量	323. 359
纯度	≥96%

产品说明

(2S, 4R)-1-(反式-叔丁氧羰基)-4-(2-氟苄基)吡咯-2-羧酸产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(2-fluorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid, CAS 号为 959579-52-3, 分子式为 C₁₇H₂₂FN₀₄, 分子量为 323. 359。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 具有明确的立体构型 (2S, 4R), 其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和氟苄基团赋予其特定的化学稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷羧酸衍生物, 该化合物是合成多肽及小分子抑制剂的关键中间体, 尤其在手性药物研发中具有重要价值。其 Boc 保护基可选择性脱除, 便于后续官能团修饰; 2-氟苄基的引入可增强脂溶性, 并可能通过氟原子效应调节生物活性分子的靶向性。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于构建蛋白酶抑制剂 (如 HCV NS3/4A 蛋白酶) 或 GPCR 配体的核心结构。
- 不对称合成: 作为手性砌块参与立体选择性反应, 合成复杂天然产物类似物。
- 放射性标记前体: 氟原子的存在使其可能用于 ¹⁸F 标记 PET 示踪剂的制备。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于 -20° C、干燥惰性气体环境中, 避免反复冻融。
- 使用前需恢复至室温并保持密闭, 防止吸湿降解。
- 溶解建议: 优先选用 DMF 或 DMSO 等极性非质子溶剂, 水溶液需调节 pH 至碱性 (>7.0) 以提高稳定性。

5. 质量控制与安全信息

- 纯度通过 HPLC (C18 柱, UV 254nm) 测定, 批次提供 COA 报告。
- 安全提示: 穿戴防护手套/眼镜, 避免吸入粉尘。若接触皮肤, 立即用大量清水

冲洗。

- 废弃物处置：按危险有机物规范处理，不可直接排入环境。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。具体应用需结合实验方案优化条件。