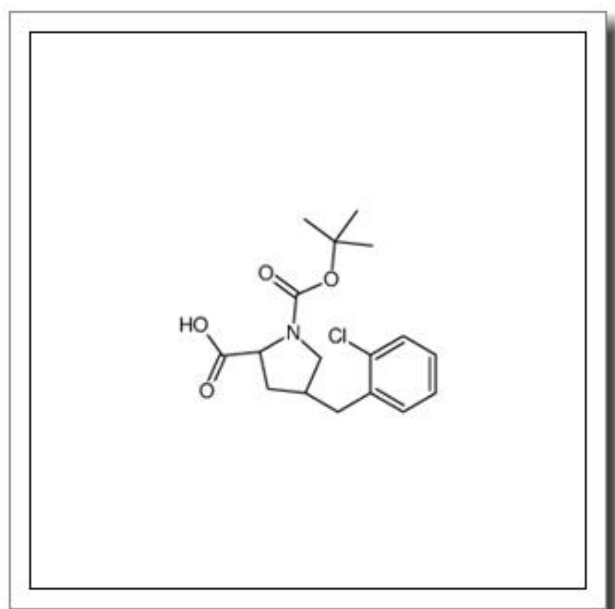


(2S,4R)-1-(反式-叔丁氧基羰基)-4-(2-氯苄基)吡咯-2-羧酸

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(2-chlorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-1-(反式-叔丁氧基羰基)-4-(2-氯苄基)吡咯-2-羧酸
CAS 号	959581-51-2
分子式	C ₁₇ H ₂₂ ClN ₁ O ₄
分子量	339.814
纯度	≥96%

产品说明

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

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 (2S, 4R) -1- (反式-叔丁氧羰基) -4- (2-氯苄基) 吡咯-2-羧酸，CAS 号 959581-51-2，分子式 $C_{17}H_{22}ClN_2O_4$ ，分子量 339.814。其结构中含吡咯烷羧酸骨架、叔丁氧羰基 (Boc) 保护基及 2-氯苄基取代基，具有明确的手性中心 (2S, 4R 构型)。纯度 $\geq 96\%$ (HPLC)，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成复杂生物活性分子的关键中间体，尤其用于构建含吡咯烷结构的药物候选物。Boc 保护基可选择性脱除，便于后续官能团修饰；2-氯苄基的引入可增强脂溶性并影响靶标结合能力。其立体构型对药物活性具有显著影响，常用于不对称合成及手性药物研发。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 作为蛋白酶抑制剂 (如 HIV 蛋白酶、凝血酶) 的合成前体
- 用于构建抗肿瘤或抗炎药物的吡咯烷羧酸衍生物
- 在肽类模拟物设计中作为构象限制性氨基酸类似物
- 作为有机合成中手性砌块，用于复杂天然产物全合成

4. 储存条件与使用建议

储存条件：密封避光保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中，惰性气体 (如氩气) 保护可延长稳定性。开封后建议分装使用，避免反复冻融。

使用建议：实验前恢复至室温，称量时需干燥环境操作。溶于 DMSO 配制成母液时，建议浓度不超过 50mM。避免与强氧化剂、酸碱接触。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次验证，符合 USP/EP 标准。残留溶剂符

合 ICH Q3C 指南。

安全信息：穿戴防护手套/眼镜，避免吸入或接触皮肤。CAS 号 959581-51-2 未列入危险化学品目录，但仍需按实验室常规化学品处理。废弃物应作为有机卤化物处置。急救措施：皮肤接触时用大量清水冲洗，误食需立即就医并提供 MSDS。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。具体应用需根据实验方案进一步优化条件。