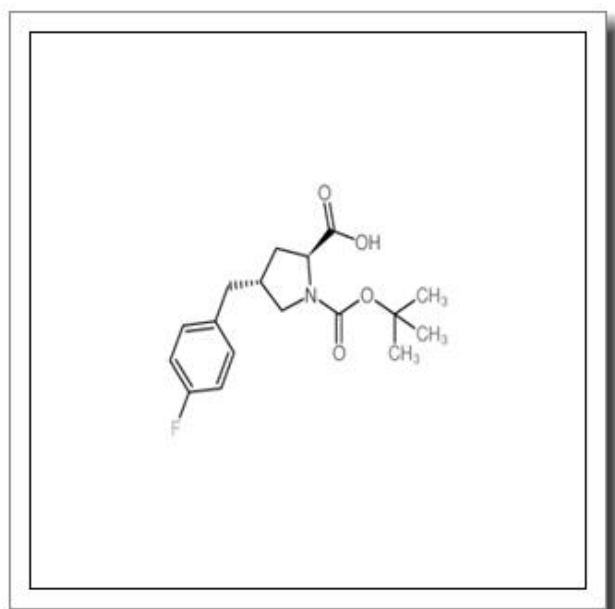


(2S,4R)-1-(叔丁氧基羰基)-4-(4-氟苄基)吡咯烷-2-羧酸

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(4-fluorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-1-(叔丁氧基羰基)-4-(4-氟苄基)吡咯烷-2-羧酸
CAS 号	959583-52-9
分子式	C17H22FN04
分子量	323. 359
纯度	≥96%

产品说明

(2S, 4R)-1-(叔丁氧基羰基)-4-(4-氟苄基)吡咯烷-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-(4-fluorobenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid, CAS 号为 959583-52-9, 分子式为 C₁₇H₂₂FN₂O₄, 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%, 具有明确的手性中心(2S, 4R 构型)。其结构包含叔丁氧羰基(Boc)保护基团、4-氟苄基取代基以及羧酸官能团, 这些特性使其在有机合成中表现出良好的反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷衍生物, 该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体, 尤其在肽类药物的合成中具有重要价值。Boc 保护基可选择性脱除, 而 4-氟苄基的引入能增强化合物的脂溶性, 影响其与生物靶点的相互作用。其手性结构对药物立体构效关系的建立至关重要, 常用于 α-氨基酸类似物的合成研究。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于蛋白酶抑制剂、GPCR 调节剂等小分子药物的结构修饰
- 肽类合成: 作为非天然氨基酸前体, 用于固相肽合成(SPPS)
- 材料科学: 手性催化剂或配体的合成原料
- 学术研究: 用于研究氟原子在药物代谢中的影响机制

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光保存于干燥环境中, 开封后需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温以避免结露。溶解性测试表明, 该化合物易溶于 DMSO、甲醇, 微溶于水, 建议在通风橱中操作。工作浓度需根据实验体系优化, 避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 确保立体构型纯度和化学纯度。安全数

据表明, 该产品对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护装备。废弃物需按危险化学品处理规范处置。详细安全信息请参阅随附的 SDS 文件。