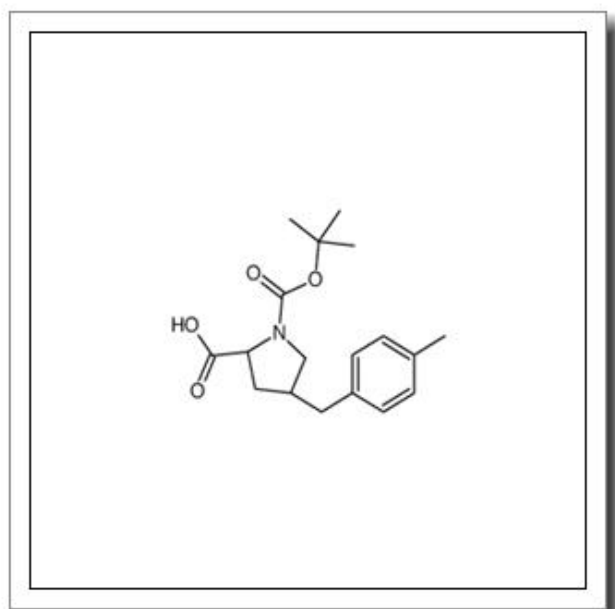


(2S,4R)-1-(叔丁氧基羰基)-4-(4-甲基苄基)吡咯烷-2-甲酸

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4-(4-methylbenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-1-(叔丁氧基羰基)-4-(4-甲基苄基)吡咯烷-2-甲酸
CAS 号	959581-21-6
分子式	C ₁₈ H ₂₅ N ₁ O ₄
分子量	319.395
纯度	≥96%

产品说明

(2S, 4R)-1-(叔丁氧基羰基)-4-(4-甲基苄基)吡咯烷-2-甲酸产品说明

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-methylbenzyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid, 中文名称为(2S, 4R)-1-(叔丁氧基羰基)-4-(4-甲基苄基)吡咯烷-2-甲酸, CAS 号为 959581-21-6, 分子式为 C₁₈H₂₅N₁O₄, 分子量为 319.395。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), 其结构中的叔丁氧基羰基(Boc)保护基和羧酸基团使其在有机合成中具有重要应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷衍生物, 该化合物是合成多肽及类肽分子的关键中间体, 尤其适用于构建具有特定立体构型的生物活性分子。Boc 保护基的引入可增强其稳定性, 便于后续脱保护反应。其结构中的 4-甲基苄基侧链可调节化合物的疏水性, 在药物设计中被广泛用于优化靶标结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 用于合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物中的手性砌块。
- 多肽化学: 作为非天然氨基酸衍生物, 参与固相或液相多肽合成。
- 催化剂配体: 其手性结构可用于设计不对称合成催化剂。
- 生物探针开发: 标记或修饰生物分子以研究蛋白质相互作用。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 密封保存于-20° C 干燥环境中, 避免光照与湿气。
- 使用建议: 溶解于二甲基亚砜(DMSO)或二氯甲烷等有机溶剂, 建议在惰性气体(如氮气)保护下操作。开封后需尽快使用, 剩余产品应重新密封并冷冻保存。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 测定纯度(≥96%), 核磁共振(NMR)与质谱(MS)验证结构。

- 安全信息: 本品对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品规范处置。

本产品仅供科研用途, 不适用于医药、食品或家庭使用。具体应用前请查阅相关文献并评估实验风险。