

(2S,4R)-4-氨基吡咯烷-1,2-二甲酸 1-叔丁酯

(2S, 4R)-1-Boc-4-aminopyrrolidine-2-carboxylic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-1-Boc-4-aminopyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	(2S, 4R)-4-氨基吡咯烷-1, 2-二甲酸 1-叔丁酯
CAS 号	132622-69-6
分子式	C ₁₀ H ₁₈ N ₂ O ₄
分子量	230.261
纯度	≥96%

产品说明

(2S, 4R)-1-Boc-4-氨基吡咯烷-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-Boc-4-氨基吡咯烷-2-甲酸, 中文名称为(2S, 4R)-4-氨基吡咯烷-1, 2-二甲酸 1-叔丁酯, CAS 号为 132622-69-6。其分子式为 $C_{10}H_{18}N_2O_4$, 分子量为 230.261, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有手性中心(2S, 4R 构型), 属于 Boc 保护的吡咯烷羧酸衍生物, 兼具氨基和羧基活性官能团, 可溶于有机溶剂如二甲基亚砜(DMSO)和甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为非天然氨基酸衍生物, 其吡咯烷骨架和立体构型在生物活性分子设计中具有关键作用。Boc 保护基团增强了氨基的稳定性, 便于后续偶联反应。该化合物常用于构建多肽或小分子抑制剂的核心结构, 尤其适用于需要特定空间构型的药物开发, 如蛋白酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体(GPCR)配体的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本产品主要用于以下方向: 一是作为中间体用于合成抗病毒药物(如 HCV 蛋白酶抑制剂)和抗肿瘤化合物; 二是在肽类药物修饰中引入刚性吡咯烷结构以改善代谢稳定性; 三是用于手性催化剂或配体的制备。此外, 在材料科学中可用于功能化聚合物的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充入惰性气体保护, 以防 Boc 基团降解。使用前需恢复至室温并短暂离心。溶解时优先选用无水 DMSO, 若需水相反应建议现配现用。操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 验证结构。安全数据: 急性毒性 LD50 未明确报告, 但可能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, 若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：具体实验方案建议结合目标反应体系优化条件，更多技术参数可索取 COA 报告。