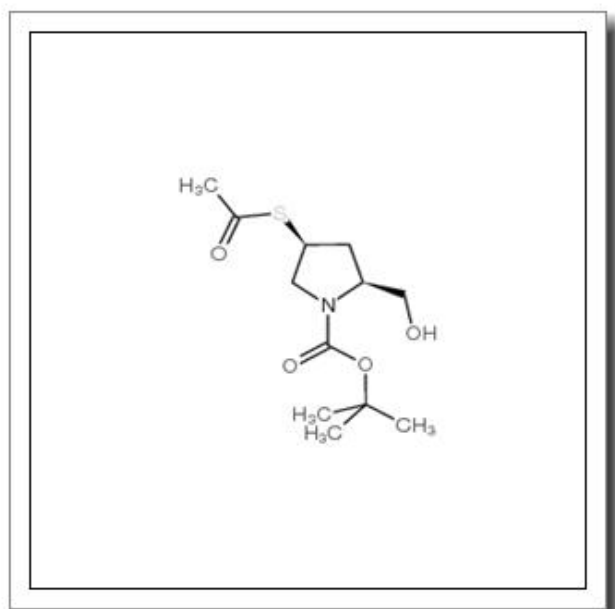


(2S,4S)-4-(乙酰基硫代)-2-(羟基甲基)-1-吡咯烷羧酸-1,1-二甲基乙酯

1-Pyrrolidinecarboxylic acid, 4-(acetylthio)-2-(hydroxymethyl)-, 1,1-dimethylethyl ester, (2S, 4S)



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Pyrrolidinecarboxylic acid, 4-(acetylthio)-2-(hydroxymethyl)-, 1,1-dimethylethyl ester, (2S, 4S)
中文名称	(2S, 4S)-4-(乙酰基硫代)-2-(羟基甲基)-1-吡咯烷羧酸-1,1-二甲基乙酯
CAS 号	148017-42-9
分子式	C ₁₂ H ₂₁ N ₁ O ₄ S
分子量	275.364
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S, 4S)-4-(乙酰基硫代)-2-(羟基甲基)-1-吡咯烷羧酸-1, 1-二甲基乙酯 (CAS 号: 148017-42-9) 是一种具有特定立体构型的吡咯烷衍生物, 分子式为 $C_{12}H_{21}N_1O_4S$, 分子量为 275.364。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度不低于 96%。其结构中含有乙酰基硫代和羟基甲基官能团, 以及叔丁酯保护基团, 这些特性使其在有机合成和生物化学领域具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体, 在药物化学和生物催化反应中表现出显著的应用潜力。其立体构型 (2S, 4S) 对酶的底物识别和催化效率具有关键影响, 常用于蛋白酶抑制剂和肽类药物的合成。乙酰基硫代基团可作为硫醇保护基, 在特定条件下释放活性巯基, 参与二硫键的形成或还原反应。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 作为关键中间体用于合成抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂) 和抗肿瘤化合物。
- 肽类修饰: 用于构建含硫肽或环肽结构, 增强肽类药物的稳定性和生物活性。
- 生化研究: 作为硫醇保护试剂或手性模板, 用于研究酶促反应机制和蛋白质相互作用。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照和潮湿。
- 使用建议: 在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与氧化剂或强酸强碱接触。溶解时可选用无水 DMF 或 DMSO 等极性溶剂。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度 ($\geq 96\%$), 并采用 NMR 和质谱进行结构确证。
- 安全信息: 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目

镜。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处理规范处置。

本产品仅供科研使用，不适用于医药或食品用途。