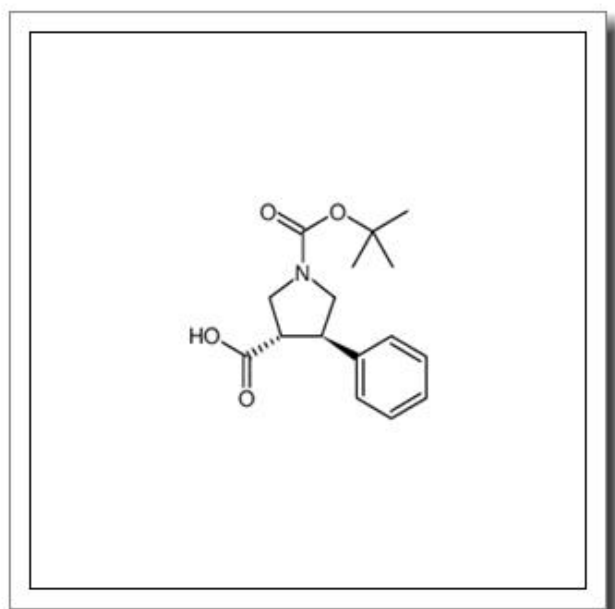


(3S,4R)-1-叔丁氧羰基-4-苯基吡咯烷-3-羧酸

1,3-Pyrrolidinedicarboxylic acid, 4-phenyl-, 1-(1,1-dimethylethyl) ester, (3S, 4R)



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,3-Pyrrolidinedicarboxylic acid, 4-phenyl-, 1-(1,1-dimethylethyl) ester, (3S, 4R)
中文名称	(3S, 4R)-1-叔丁氧羰基-4-苯基吡咯烷-3-羧酸
CAS 号	884048-45-7
分子式	C ₁₆ H ₂₁ N ₁ O ₄
分子量	291.342
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(3S, 4R)-1-叔丁氧羰基-4-苯基吡咯烷-3-羧酸（化学名称：1, 3-Pyrrolidinedicarboxylic acid, 4-phenyl-, 1-(1,1-dimethylethyl) ester, (3S, 4R)），CAS 号为 884048-45-7，分子式为 C₁₆H₂₁N₀₄，分子量为 291.342。该化合物是一种高纯度（≥96%）的手性吡咯烷衍生物，具有明确的立体构型（3S, 4R），其结构中的叔丁氧羰基（Boc）保护基和羧酸官能团使其成为有机合成与药物化学中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块，本品在不对称合成中表现出显著的应用价值。其刚性吡咯烷骨架和苯基侧链可参与氢键相互作用与疏水作用，常用于构建生物活性分子的核心结构。Boc 保护基的引入增强了化合物的稳定性，便于后续脱保护及官能团转化，在肽类化合物、蛋白酶抑制剂及 GPCR 配体的合成中具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于药物研发领域，特别是抗病毒、抗肿瘤及中枢神经系统药物的合成。具体用途包括：1) 作为手性模板合成 HIV 蛋白酶抑制剂；2) 用于构建 α -螺旋多肽模拟物；3) 在激酶抑制剂设计中作为关键中间体。此外，其羧酸基团可通过酯化、酰胺化等反应进一步衍生化，满足多样性药物分子的构建需求。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光干燥储存，长期保存需充惰性气体保护。开封后需避免反复冻融，以防吸湿降解。使用前需恢复至室温并充分干燥，反应体系中建议加入分子筛以控制水分。溶解性测试表明，本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，旋光度、熔点等理化指标符合标准。操作时需佩戴

防护手套、护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。安全数据表（SDS）显示其 LD50 未明确，但作为化学品仍需通风橱中处理。废弃物应按照有机危险废物规范处置。