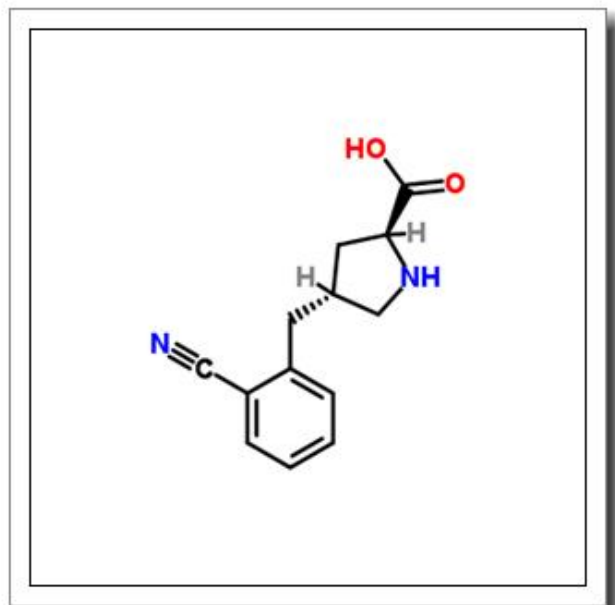


(4R)-4-(2-Cyanobenzyl)-L-proline

(4R)-4-(2-Cyanobenzyl)-L-proline



产品基本信息

属性	值
化学名称	(4R)-4-(2-Cyanobenzyl)-L-proline
中文名称	(4R)-4-(2-Cyanobenzyl)-L-proline
CAS 号	1049981-76-1
分子式	C ₁₃ H ₁₄ N ₂ O ₂
分子量	230.262
纯度	≥96%

产品说明

(4R)-4-(2-Cyanobenzyl)-L-proline 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(4R)-4-(2-氰基苄基)-L-脯氨酸，CAS 号 1049981-76-1，分子式 C₁₃H₁₄N₂O₂，分子量 230.262。其结构中含有一个 L-脯氨酸骨架与 2-氰基苄基的立体选择性修饰，纯度 ≥96% (HPLC 测定)。该化合物在极性有机溶剂（如甲醇、DMSO）中具有良好溶解性，水溶性中等，需避免与强氧化剂接触。

2. 生物化学功能与重要性

作为脯氨酸衍生物，本品通过氰基苄基的引入显著改变母体分子的空间构象和电子分布特性，使其成为酶活性位点研究的理想探针分子。其手性中心（4R 构型）在肽类模拟物设计中具有关键作用，可特异性调控蛋白质-配体相互作用，广泛应用于蛋白酶抑制剂开发和构效关系研究。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：

- 药物研发：作为 DPP-4（二肽基肽酶-4）抑制剂的关键中间体，用于治疗 II 型糖尿病药物的合成
- 生化工具：在金属蛋白酶抑制实验中作为对照化合物
- 不对称合成：作为手性助剂参与复杂天然产物的全合成
- 结构生物学：通过 X 射线晶体学辅助解析酶-抑制剂复合物三维结构

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于密闭容器中，-20℃干燥避光保存，保质期 24 个月。使用前需恢复至室温并干燥处理（推荐 P205 干燥器）。工作溶液建议现配现用，若需保存应充氮避光（DMSO 溶液-80℃可稳定 3 个月）。实验操作需在通风橱中进行，避免直接吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，符合 ACS 级标准。MSDS 数据显示其急性毒性 LD50（大鼠口服）>2000 mg/kg，但仍需佩戴防护手套/眼镜操作。废弃物处理应遵循有机氰化物处置规范，使用 10%次氯酸钠溶液降解后交由专业机构处理。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗至少 15 分钟并就医。

注：本说明基于当前研究数据，具体应用需根据实验体系优化条件。更多技术参数可索取 COA 证书。