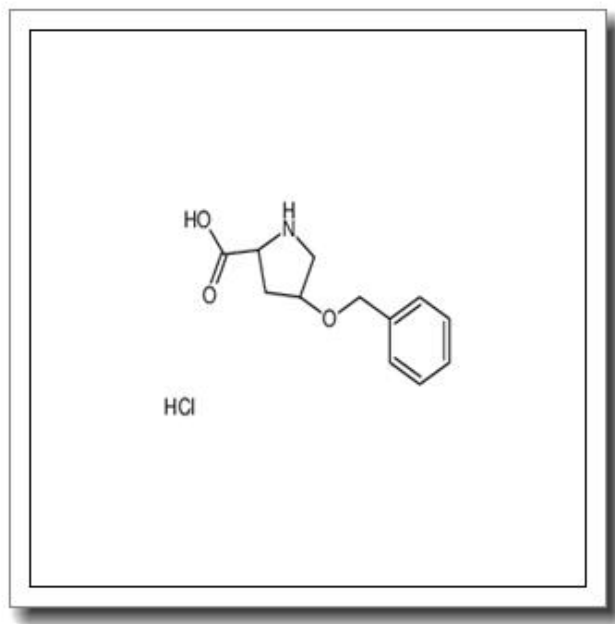


(4R)-4-(苄氧基)-L-脯氨酸盐酸盐

(2S, 4R)-4-(Benzyloxy)pyrrolidine-2-carboxylic acid hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4R)-4-(Benzyloxy)pyrrolidine-2-carboxylic acid hydrochloride
中文名称	(4R)-4-(苄氧基)-L-脯氨酸盐酸盐
CAS 号	66831-16-1
分子式	C ₁₂ H ₁₆ ClN ₃ O ₃
分子量	257.713
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(4R)-4-(苄氧基)-L-脯氨酸盐酸盐 (CAS 号: 66831-16-1) 是一种非天然氨基酸衍生物, 化学式为 $C_{12}H_{16}ClN_3O_3$, 分子量为 257.713。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 其结构特征为脯氨酸骨架的 4 位羟基被苄基保护, 并以盐酸盐形式存在。其立体构型 (2S, 4R) 在生物活性中具有关键作用, 常用于手性合成与药物研发。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为脯氨酸的修饰衍生物, 在肽类合成中可作为构象限制性氨基酸, 通过引入苄氧基增强疏水性并调控分子空间取向。其在蛋白酶抑制剂、抗菌肽及 GPCR 靶向药物设计中具有重要价值, 能够通过稳定二级结构 (如 β -转角) 优化生物活性。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 用于合成抗肿瘤、抗病毒肽类先导化合物, 尤其适用于基于脯氨酸骨架的拟肽物设计。
- 不对称合成: 作为手性砌块参与催化氢化、偶联反应等有机转化。
- 生化研究: 用于探究酶底物特异性或蛋白质-配体相互作用机制。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $2-8^{\circ}\text{C}$ 干燥环境中, 避免光照与湿气。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 溶解推荐使用无水 DMF 或 DMSO。长期储存需定期检测纯度, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据:

- 危害提示: 可能引起皮肤/眼睛刺激, 吸入或食入有害。
- 防护措施: 操作时佩戴防尘口罩、护目镜及丁腈手套, 在通风橱中进行称量。
- 废弃物处理: 按危险化学品规范处置, 避免直接排放。

注：具体实验方案需结合目标反应体系优化，建议参考文献或进行小试验证。