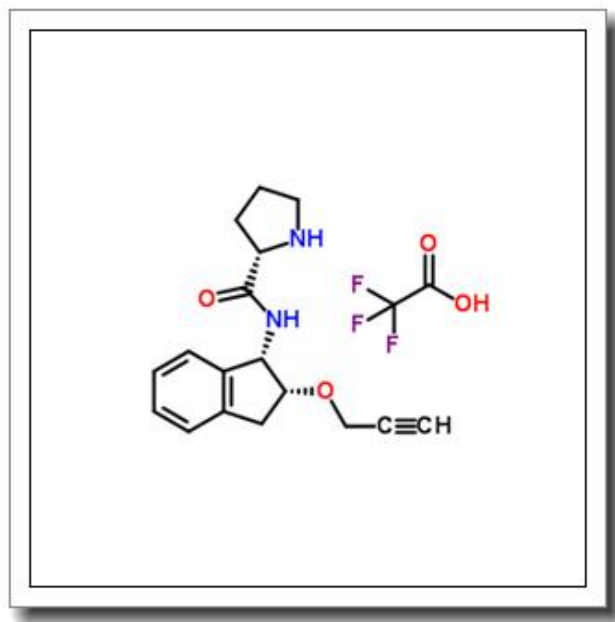


N-[(1S,2R)-2-(2-Propyn-1-yloxy)-2,3-dihydro-1H-inden-1-yl]-L-prolinamide trifluoroacetate (1:1)

N-[(1S, 2R)-2-(2-Propyn-1-yloxy)-2, 3-dihydro-1H-inden-1-yl]-L-prolinamide trifluoroacetate (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-[(1S, 2R)-2-(2-Propyn-1-yloxy)-2, 3-dihydro-1H-inden-1-yl]-L-prolinamide trifluoroacetate (1:1)
中文名称	N-[(1S, 2R)-2-(2-Propyn-1-yloxy)-2, 3-dihydro-1H-inden-1-yl]-L-prolinamide trifluoroacetate (1:1)
CAS 号	1514922-97-4
分子式	C ₁₉ H ₂₁ F ₃ N ₂ O ₄
分子量	398.376
纯度	≥96%

产品说明

N-[(1S, 2R)-2-(2-丙炔-1-基氧基)-2, 3-二氢-1H-茛-1-基]-L-脯氨酸三氟乙酸盐(1:1)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 N-[(1S, 2R)-2-(2-丙炔-1-基氧基)-2, 3-二氢-1H-茛-1-基]-L-脯氨酸三氟乙酸盐(1:1)，CAS 号 1514922-97-4，分子式 C₁₉H₂₁F₃N₂O₄，分子量 398.376。其结构中包含茛环、L-脯氨酸片段及三氟乙酸盐配位基团，具有手性中心（1S, 2R 构型），纯度 ≥96%（HPLC）。该化合物在极性有机溶剂如 DMSO、甲醇中易溶，水溶性中等，需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为脯氨酸衍生物，该化合物可通过调控脯氨酸代谢途径影响细胞信号转导。其丙炔氧基团赋予分子潜在的点击化学反应活性，适用于生物正交标记；茛环结构可能参与芳香族氨基酸受体相互作用，在激酶抑制或 GPCR 调节研究中具有应用潜力。三氟乙酸盐形式增强了化合物的稳定性和溶解性，适合体外实验体系。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于药物研发领域：

- (1) 作为小分子探针用于靶标蛋白的共价修饰研究
- (2) 构建 PROTAC 分子中的靶蛋白配体模块
- (3) 神经退行性疾病相关酶抑制剂的先导化合物
- (4) 有机合成中手性砌块用于复杂分子构建

建议使用浓度需根据实验体系优化，常规体外研究起始浓度为 1-10 μM。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃干燥避光环境，开封后建议分装保存。溶解时优先选用 DMSO 配制母液（建议浓度 10 mM），避免反复冻融。工作液需现配现用，水溶液体系建议在 12 小时内使用。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证，符合细胞级实验标准。MSDS 数据显示其急性毒性 LD50（大鼠口服）>500 mg/kg，属于刺激性化学品。操作时应佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套，若接触皮肤需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵循有机卤化物处置规范，不可直接排入下水系统。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验体系进行验证。产品规格可能因批次略有差异，请以随货质检报告为准。