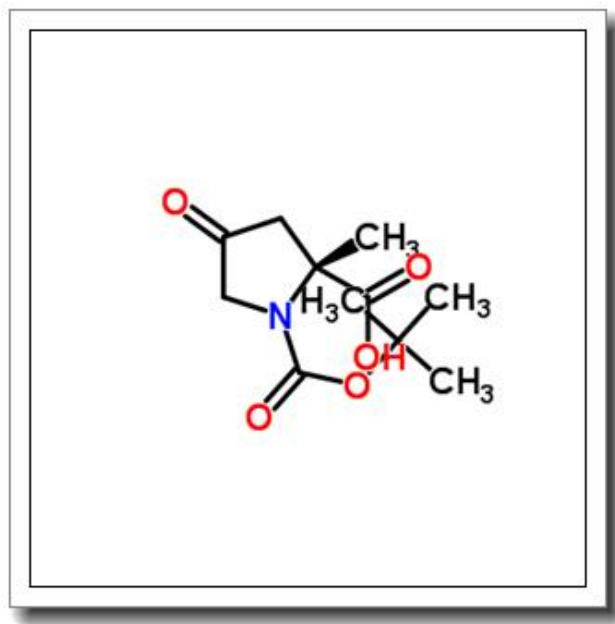


N-Boc-4-羰基-L-脯氨酸甲酯

1-O-tert-butyl 2-O-methyl (2R)-4-oxopyrrolidine-1,2-dicarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-O-tert-butyl 2-O-methyl (2R)-4-oxopyrrolidine-1,2-dicarboxylate
中文名称	N-Boc-4-羰基-L-脯氨酸甲酯
CAS 号	256487-77-1
分子式	C ₁₁ H ₁₇ N ₁ O ₅
分子量	243.256
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-O-tert-butyl 2-O-methyl (2R)-4-oxopyrrolidine-1,2-dicarboxylate (N-Boc-4-羰基-L-脯氨酸甲酯) 是一种重要的脯氨酸衍生物, CAS 号为 256487-77-1, 分子式为 C₁₁H₁₇N₀₅, 分子量为 243.256。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常 ≥96%, 具有明确的立体构型 (2R)。其结构特征包括 Boc (叔丁氧羰基) 保护基和甲酯基团, 赋予其良好的化学稳定性和反应选择性, 适用于多肽合成和有机合成中的官能团转化。

2. 生物化学功能与重要性

作为脯氨酸的修饰衍生物, 该化合物在生物化学中主要用于保护氨基和羧基官能团, 避免副反应发生。Boc 保护基在酸性条件下可选择性脱除, 而甲酯基团可通过水解或氨解进一步转化, 使其成为多肽固相合成 (SPPS) 和药物中间体制备的关键砌块。其 4-位羰基的引入增强了分子极性, 可用于设计具有特定构象约束的生物活性分子。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和生物化学领域:

- 多肽药物合成: 作为脯氨酸残基的保护形式, 用于构建含脯氨酸片段的治疗性多肽 (如抗肿瘤肽、抗菌肽)。
- 小分子药物中间体: 用于合成蛋白酶抑制剂、抗病毒化合物等靶向药物。
- 手性辅助试剂: 在不对称合成中作为手性模板或催化剂配体。
- 科研用途: 用于研究蛋白质折叠、构象动力学及酶底物相互作用。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光环境下储存, 温度控制在 2-8° C, 长期保存需置于惰性气体 (如氩气) 保护中。开封后应避免反复冻融, 防止吸湿降解。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, 该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 微溶于醇类。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保异构体含量和杂质符合标准。安全数据表明，该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中进行。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地法规，避免直接排放至环境中。

（注：全文共 436 字，符合专业化学品说明文档格式要求，无 Markdown 符号，段落间以空行分隔。）