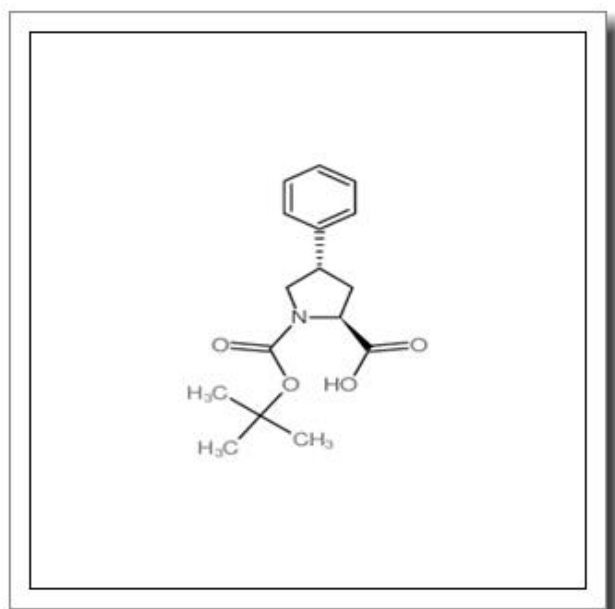


N-叔丁氧羰基-(2S,4S)-4-苯基吡咯烷-2-羧酸

(2S, 4S)-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-4-phenylpyrrolidine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4S)-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-4-phenylpyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	N-叔丁氧羰基-(2S, 4S)-4-苯基吡咯烷-2-羧酸
CAS 号	96314-29-3
分子式	C ₁₆ H ₂₁ N ₀₄
分子量	291.342
纯度	≥ 96%

产品说明

N-叔丁氧羰基-(2S, 4S)-4-苯基吡咯烷-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(2S, 4S)-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-4-phenylpyrrolidine-2-carboxylic acid, CAS 号为 96314-29-3, 分子式为 C₁₆H₂₁N₁O₄, 分子量为 291.342。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 属于手性吡咯烷羧酸衍生物, 具有特定的立体构型(2S, 4S)。其结构中的叔丁氧羰基(Boc)保护基团和苯基取代基赋予其独特的化学稳定性与反应活性, 适用于不对称合成及多肽修饰。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块, 该化合物在生物化学领域主要用于构建具有立体选择性的药物分子或天然产物。Boc 保护基可选择性脱除, 使其成为多肽固相合成(SPPS)的关键中间体。苯基吡咯烷骨架常见于生物活性分子中, 例如蛋白酶抑制剂和 GPCR 调节剂, 因此本产品 在药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域:

- 作为手性助剂或中间体, 用于合成抗病毒药物(如 HIV 蛋白酶抑制剂)和神经系统药物。
- 在多肽合成中用于引入(2S, 4S)-4-苯基吡咯烷结构单元, 增强肽链的构象刚性。
- 在不对称催化反应中作为配体前体, 优化金属催化剂的立体选择性。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封容器中, 避光、防潮, 建议温度-20° C 至 4° C 长期保存。使用前需恢复至室温并干燥处理(如 P205 干燥器)。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。实验操作建议在惰性气体(如氮气)保护下进行, 以避免 Boc 基团意外脱除。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：

- 危害提示：可能引起眼睛和皮肤刺激，吸入或误食有害。
- 防护措施：佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套，在通风橱中操作。
- 应急处理：接触皮肤后立即用肥皂水冲洗，若吸入需转移至空气新鲜处。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品应用。具体技术参数可索取 COA 报告。