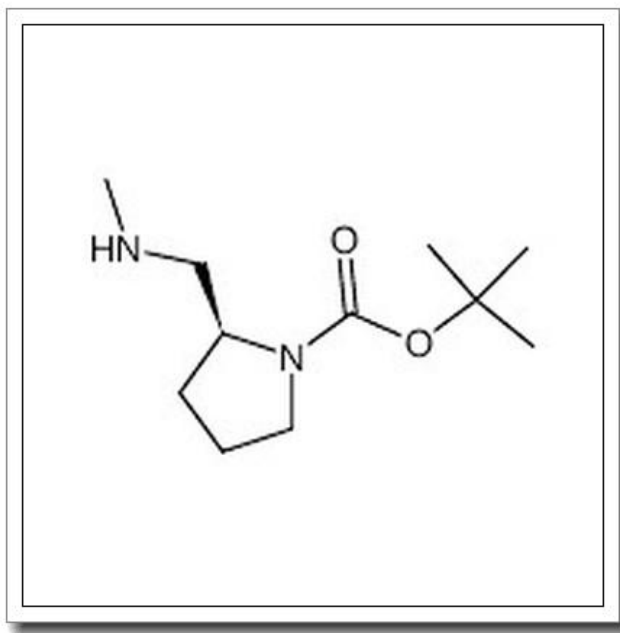


(S)-1-boc-2-(甲基氨基甲基)-吡咯烷

tert-butyl (2S)-2-(methylaminomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl (2S)-2-(methylaminomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate</i>
中文名称	(S)-1-boc-2-(甲基氨基甲基)-吡咯烷
CAS 号	191231-58-0
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	214.305
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(S)-1-boc-2-(甲基氨基甲基)-吡咯烷, 化学名称为 tert-butyl (2S)-2-(methylaminomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate, CAS 号 191231-58-0, 分子式 C₁₁H₂₂N₂O₂, 分子量 214.305。该化合物是一种手性吡咯烷衍生物, 具有光学活性, 纯度高于 96%。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团赋予其良好的稳定性, 适用于多种有机合成反应。常温下为白色至类白色结晶或粉末, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、甲醇等, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块, (S)-1-boc-2-(甲基氨基甲基)-吡咯烷在不对称合成中具有重要作用。其分子中的氨基甲基和吡咯烷骨架可作为配体或中间体, 参与构建复杂生物活性分子, 尤其在药物化学中用于合成靶向神经系统或抗感染类化合物。Boc 保护基的存在便于后续选择性脱保护, 满足多步合成需求。

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精细化工领域。具体用途包括: 1) 作为手性助剂用于不对称催化反应; 2) 合成 β -内酰胺类抗生素或神经受体调节剂的中间体; 3) 用于构建多肽模拟物或酶抑制剂的核心结构。在抗抑郁药物和抗病毒药物的早期研发中亦有文献报道。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。开封后应避免反复冻融, 以防吸湿降解。使用前需恢复至室温并干燥处理, 推荐在惰性氛围 (如氩气) 下进行反应操作。溶解时优先选用无水级溶剂, 并配合分子筛除水。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据: 1) 避免吸入或皮肤接触, 操作时需佩戴防护手套及护目镜; 2) 遇强酸强碱可能释放有毒气

体; 3) 废弃物应作为有害化学品处理。急救措施: 如接触眼睛, 立即用大量清水冲洗并就医。提供完整的 MSDS 报告备案。