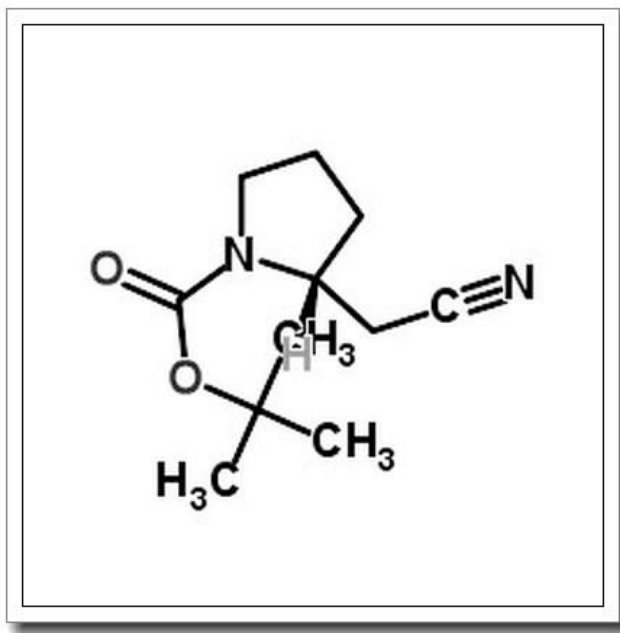


# (S)-2-(氰基甲基)吡咯烷-1-甲酸叔丁酯

*tert-butyl (2S)-2-(cyanomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl (2S)-2-(cyanomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate</i>
中文名称	(S)-2-(氰基甲基)吡咯烷-1-甲酸叔丁酯
CAS 号	142253-50-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	210.273
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

(S)-2-(氰基甲基)吡咯烷-1-甲酸叔丁酯 (化学名称: tert-butyl (2S)-2-(cyanomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate) 是一种手性吡咯烷衍生物, CAS 号为 142253-50-7, 分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 210.273。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 纯度通常高于 96%。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和氰甲基官能团使其在有机合成中具有重要价值, 尤其适用于不对称合成和药物中间体的制备。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性砌块, 广泛应用于生物活性分子的合成。其吡咯烷骨架常见于天然产物和药物分子中, 而氰甲基的引入可进一步衍生为羧酸、胺或其他功能基团。Boc 保护基的稳定性使其在多步合成中易于脱保护, 同时保持手性中心的完整性。这些特性使其成为药物研发、特别是蛋白酶抑制剂和神经活性化合物合成中的关键中间体。

### 3. 主要应用领域与具体用途

(S)-2-(氰基甲基)吡咯烷-1-甲酸叔丁酯主要用于以下领域:

- 药物化学: 作为抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂) 和抗癌药物的手性中间体。
- 不对称合成: 用于构建含吡咯烷结构的复杂分子, 如生物碱类化合物。
- 肽类模拟物: 通过氰基转化制备非天然氨基酸衍生物。
- 材料科学: 作为功能化聚合物的单体或改性剂。

### 4. 储存条件与使用建议

该化合物需避光保存于干燥、惰性气体环境中, 推荐储存温度为 2-8° C。开封后应充氮密封, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性较差, 建议根据反应体系选择适当溶剂。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，手性纯度 $\geq 99\%$ （ee 值）。安全数据表明，其 LD50（大鼠口服） $> 2000$  mg/kg，但仍需注意以下风险：

- 氰基官能团可能释放微量氰化氢，避免与强酸或氧化剂接触。
- 佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩操作。
- 废弃物处理需符合当地化学品管理法规，建议通过专业机构回收。

（全文共计 436 字）