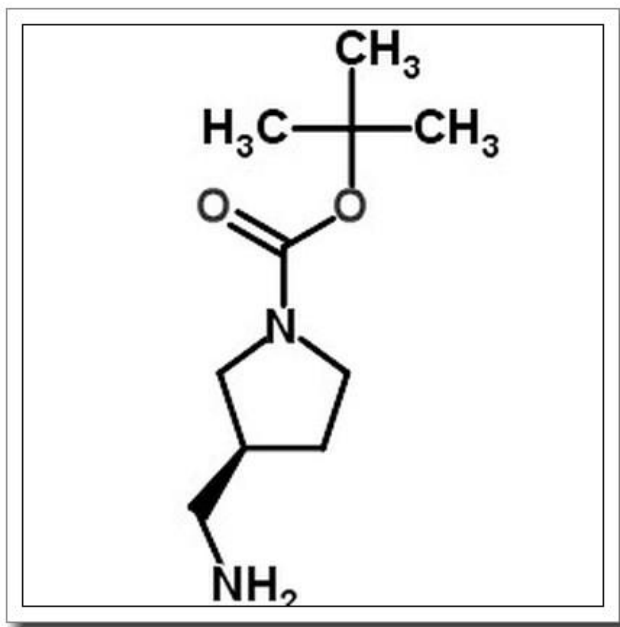


(S)-1-Boc-3-氨基吡咯烷

tert-butyl (3S)-3-(aminomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl (3S)-3-(aminomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate</i>
中文名称	(S)-1-Boc-3-氨基吡咯烷
CAS 号	199175-10-5
分子式	C ₁₀ H ₂₀ N ₂ O ₂
分子量	200.278
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-1-Boc-3-氨基吡咯烷 (化学名称: tert-butyl (3S)-3-(aminomethyl)pyrrolidine-1-carboxylate) 是一种重要的手性吡咯烷衍生物, CAS 号为 199175-10-5, 分子式为 C₁₀H₂₀N₂O₂, 分子量为 200.278。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有 Boc 保护基团和氨基官能团, 在有机合成中表现出优异的立体选择性和反应活性。其结构中的吡咯烷环和 Boc 保护基使其在酸性条件下易于脱保护, 同时氨基位点可作为进一步修饰的活性位点。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块, (S)-1-Boc-3-氨基吡咯烷在药物化学和生物化学中具有重要价值。其刚性吡咯烷骨架可模拟天然生物碱结构, 常用于构建药物分子中的活性中心。Boc 保护基的引入增强了化合物的稳定性, 便于储存和后续反应。该分子在不对称合成、酶抑制剂设计及肽类化合物修饰中发挥关键作用, 尤其适用于神经活性药物和 GPCR 靶向药物的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药中间体合成, 特别是抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂) 和中枢神经系统药物 (如多巴胺受体调节剂) 的研发。具体用途包括: 1) 作为手性胺源参与偶联反应; 2) 用于构建螺环或稠环化合物; 3) 在固相肽合成中作为结构修饰单元。此外, 在材料科学领域可用于功能化聚合物的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、干燥惰性气体 (如氩气) 保护下长期储存, 短期使用可置于 2-8° C 避光保存。开封后需充氮密封, 避免反复冻融。使用前需恢复至室温并检查性状变化。反应体系中建议在水条件下操作, 若需脱 Boc 保护, 可使用三氟乙酸/二氯甲烷 (1:1) 体系。

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, 确保立体化学纯度和化学纯度符

合标准。安全数据：1) 避免吸入粉尘或接触皮肤；2) 操作时需佩戴防护眼镜和丁腈手套；3) 在通风橱中进行称量；4) 如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。

（注：实际使用时请参阅最新版物质安全数据表 MSDS）