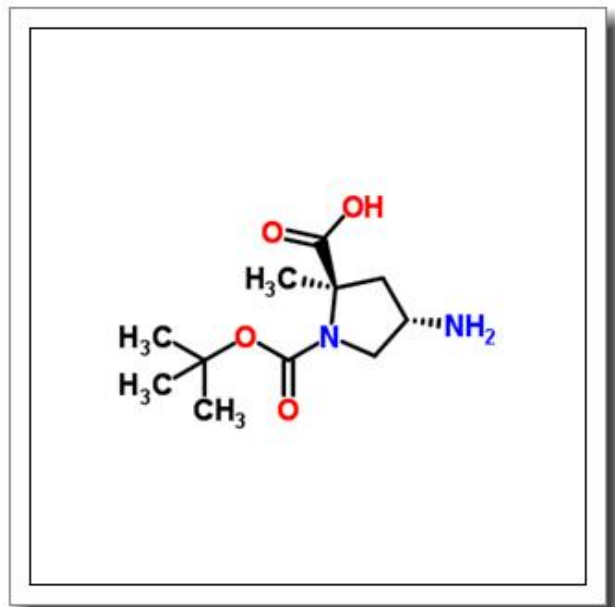


(2R,4S)-1-叔丁基 2-甲基 4-氨基吡咯烷-1,2-二甲酸酯

Methyl (2R, 4S)-4-aminopyrrolidine-2-carboxylate, N1-BOC protected



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl (2R, 4S)-4-aminopyrrolidine-2-carboxylate, N1-BOC protected
中文名称	(2R, 4S)-1-叔丁基 2-甲基 4-氨基吡咯烷-1, 2-二甲酸酯
CAS 号	254881-77-1
分子式	C ₁₁ H ₂₀ N ₂ O ₄
分子量	244. 288
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2R, 4S)-1-叔丁基 2-甲基 4-氨基吡咯烷-1, 2-二甲酸酯 (CAS 号: 254881-77-1) 是一种 N1-BOC 保护的吡咯烷衍生物, 分子式为 $C_{11}H_{20}N_2O_4$, 分子量为 244.288。该化合物为手性分子, 具有 (2R, 4S) 立体构型, 纯度通常不低于 96%。其结构中的 BOC (叔丁氧羰基) 保护基团可增强氨基的稳定性, 使其在有机合成中更易于操作。该物质通常表现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, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性吡咯烷骨架的重要中间体, 该化合物在生物活性分子的合成中具有关键作用。其结构中的氨基和酯基为后续衍生化提供了灵活的修饰位点, 常用于构建药物分子中的杂环结构。BOC 保护基团可在酸性条件下选择性脱除, 使其成为多肽合成和手性催化剂设计中的理想砌块。此外, 其立体特异性对生物活性分子的药理性质具有显著影响。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和精细化工领域, 具体包括:

- 作为抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂) 和抗癌药物的手性合成中间体
- 用于构建天然产物中的吡咯烷环结构
- 在不对称催化反应中作为配体前体
- 作为多肽模拟物设计的核心骨架

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下密封保存于干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体保护。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时优先选用无水有机溶剂, 若需脱除 BOC 保护基, 可使用三氟乙酸/二氯甲烷体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$, 同时提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 数

据以验证结构。安全信息:

- 危险代码: Xi (刺激性)
- 安全防护: 佩戴防护手套、护目镜和实验服
- 急救措施: 如接触眼睛, 立即用大量清水冲洗并就医
- 废弃物处理: 按危险化学品规范处置

本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版材料安全数据表 (MSDS) 获取详细信息。