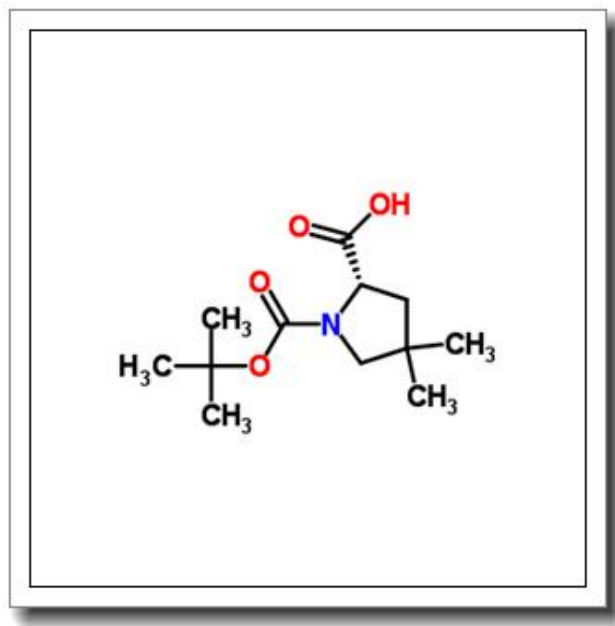


S-1-Boc-4,4-二甲基吡咯烷-2-甲酸

(S)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4,4-dimethylpyrrolidine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4,4-dimethylpyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	S-1-Boc-4,4-二甲基吡咯烷-2-甲酸
CAS 号	1001353-87-2
分子式	C ₁₂ H ₂₁ N ₁ O ₄
分子量	243.299
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-1-(tert-Butoxycarbonyl)-4,4-dimethylpyrrolidine-2-carboxylic acid
(中文名: S-1-Boc-4,4-二甲基吡咯烷-2-甲酸) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 1001353-87-2, 分子式为 C₁₂H₂₁N₁O₄, 分子量为 243.299。该化合物属于吡咯烷羧酸衍生物, 具有手性中心, 其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团赋予其良好的化学稳定性。产品纯度 ≥96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成和药物化学中具有重要价值。Boc 保护基的存在使其成为多肽和手性药物合成中的关键中间体, 尤其适用于需要选择性脱保护的复杂反应体系。其 4,4-二甲基结构增强了空间位阻效应, 可显著提高特定反应的立体选择性。此外, 吡咯烷骨架广泛存在于生物活性分子中, 使得该化合物成为构建抗生素、抗病毒药物及酶抑制剂的重要模块。

3. 主要应用领域与具体用途

S-1-Boc-4,4-二甲基吡咯烷-2-甲酸主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为手性砌块用于合成靶向治疗药物, 如蛋白酶抑制剂或 GPCR 调节剂。
- 多肽化学: 通过 Boc 固相合成法构建具有特定构象的多肽链。
- 材料科学: 参与制备功能性高分子材料或液晶化合物。

实验室中常作为不对称催化反应的配体或中间体, 亦可用于结构修饰以优化先导化合物的理化性质。

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) 以降低水解风险。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥环境下操作, 若需溶解

推荐使用无水 DMF 或 THF 溶剂。实验过程中建议佩戴防护手套和护目镜，确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保杂质含量符合标准（总杂质<4%）。MSDS 数据显示其急性毒性较低，但仍可能引起皮肤或眼部刺激。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地法规，避免直接排放至环境中。运输时归类为普通化学品，但需避免与强氧化剂共存。