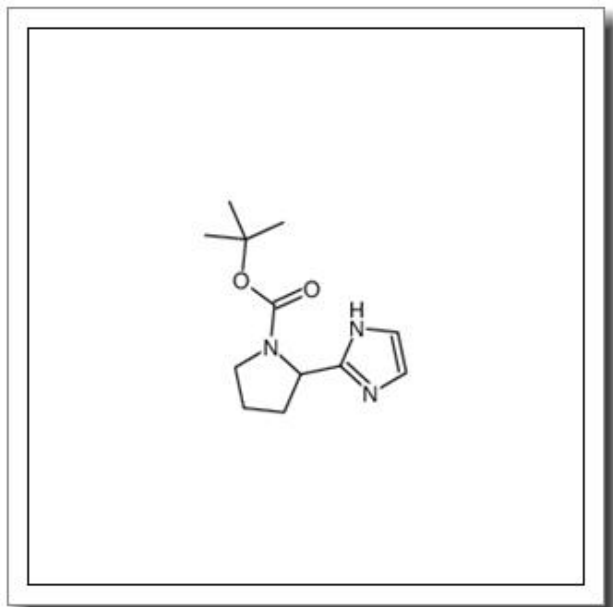


(S)-2-(1H-咪唑-2-基)-吡咯烷-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl (2S)-2-(1H-imidazol-2-yl)pyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl (2S)-2-(1H-imidazol-2-yl)pyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	(S)-2-(1H-咪唑-2-基)-吡咯烷-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1007882-58-7
分子式	C ₁₂ H ₁₉ N ₃ O ₂
分子量	237.298
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-2-(1H-咪唑-2-基)-吡咯烷-1-羧酸叔丁酯 (化学名称: tert-butyl (2S)-2-(1H-imidazol-2-yl)pyrrolidine-1-carboxylate) 是一种具有特定立体构型的杂环化合物, CAS 号为 1007882-58-7。其分子式为 C₁₂H₁₉N₃O₂, 分子量为 237.298, 纯度通常 ≥96%。该化合物结构中含有咪唑环和吡咯烷环, 叔丁氧羰基 (Boc) 作为保护基团, 赋予其良好的化学稳定性和反应选择性。其外观通常为白色至类白色固体, 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

该化合物在生物化学和药物化学领域具有重要价值。咪唑环作为常见的药效团, 广泛参与氢键形成和金属离子配位, 而吡咯烷结构则常见于生物活性分子中。Boc 保护基的引入使其在肽类合成和手性中间体制备中表现出色, 尤其适用于不对称合成和酶抑制剂开发。其立体特异性 (S 构型) 在靶向药物设计中可显著影响生物活性和选择性。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体, 该产品主要用于以下领域:

- (1) 药物研发: 用于合成蛋白酶抑制剂、抗肿瘤药物及神经系统药物, 特别是针对 HIV 和 HCV 的病毒蛋白酶抑制剂;
- (2) 不对称催化: 作为手性配体或催化剂前体, 参与 C-C 键形成等不对称反应;
- (3) 肽类修饰: 通过 Boc 保护/脱保护策略, 实现氨基酸衍生物的选择性官能团化;
- (4) 生化探针开发: 其咪唑结构可用于模拟组氨酸残基功能, 研究酶活性位点机制。

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, 建议分装使用。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目

镜。溶解推荐使用干燥的 DMSO 或 DMF，溶液现配现用。避免与强氧化剂、强酸强碱接触，以防 Boc 基团水解或结构降解。

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，确保立体纯度和化学纯度符合标准。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需遵循 GHS 标准，安全标识包括 H315（造成皮肤刺激）、H319（造成严重眼刺激）和 H335（可能引起呼吸道刺激）。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。