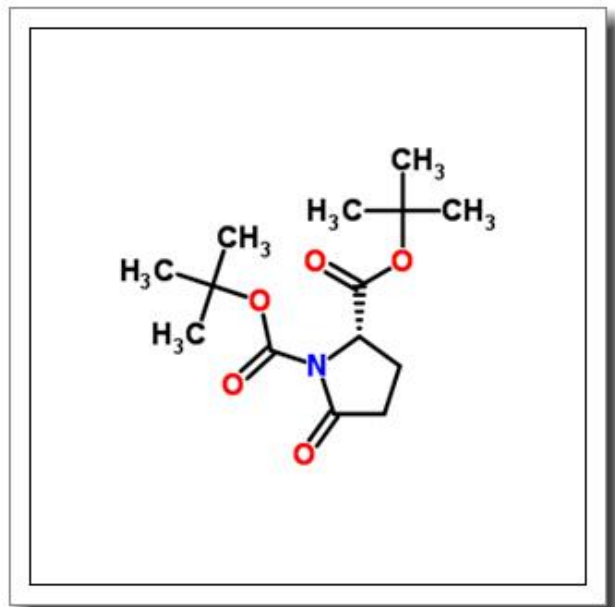


# (S)-N-叔丁氧羰基-2-吡咯烷酮-5-甲酸叔丁酯

*ditert-butyl (2S)-5-oxopyrrolidine-1,2-dicarboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ditert-butyl (2S)-5-oxopyrrolidine-1,2-dicarboxylate
中文名称	(S)-N-叔丁氧羰基-2-吡咯烷酮-5-甲酸叔丁酯
CAS 号	91229-91-3
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> N <sub>1</sub> O <sub>5</sub>
分子量	285.336
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为(S)-N-叔丁氧羰基-2-吡咯烷酮-5-甲酸叔丁酯 (ditert-butyl (2S)-5-oxopyrrolidine-1,2-dicarboxylate), 化学式为 C<sub>14</sub>H<sub>23</sub>N<sub>05</sub>, 分子量 285.336, CAS 号 91229-91-3。该化合物是一种高纯度 (≥96%) 的手性吡咯烷酮衍生物, 具有两个叔丁氧羰基 (Boc) 保护基, 结构稳定且易于后续脱保护反应。其立体构型为 S 型, 适用于不对称合成及手性药物开发。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为重要的医药中间体, 该化合物在肽类合成和蛋白酶抑制剂设计中具有关键作用。其 Boc 保护基可选择性脱除, 为后续引入其他功能基团提供便利。此外, 吡咯烷酮结构是多种生物活性分子 (如抗病毒、抗肿瘤药物) 的核心骨架, 因此本品在药物研发中具有广泛的应用潜力。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- 药物合成: 作为手性砌块用于抗 HIV 蛋白酶抑制剂、抗炎药物等的制备。
- 有机合成: 参与多肽偶联反应或作为催化剂配体。
- 科研开发: 用于研究酶抑制机制或新型生物标记物的设计。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存, 长期储存需充氮保护。使用时需在干燥惰性气体环境下操作 (如氩气手套箱), 避免接触水分或强酸强碱。溶解性测试表明, 本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 不溶于水。

### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 其 LD<sub>50</sub> (大鼠口服) >2000 mg/kg, 但仍需佩戴防护手套和护目镜操作。MSDS 显示其属于刺激性化学品, 避免吸入粉尘或接触皮肤。废弃物处置需遵循当地法规, 不可直接排入环境。

注：具体实验方案需结合目标反应体系优化，建议参考文献或咨询专业技术支持。