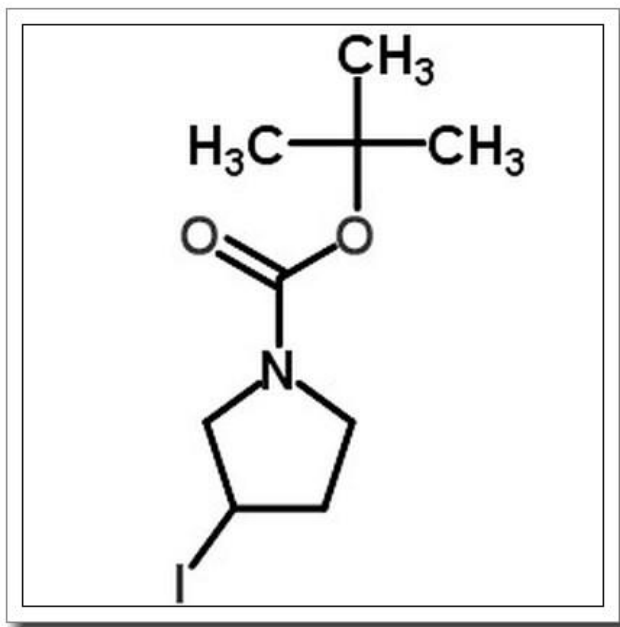


1-BOC-3-碘吡咯烷

tert-butyl 3-iodopyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-iodopyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	1-BOC-3-碘吡咯烷
CAS 号	774234-25-2
分子式	C ₉ H ₁₆ IN ₂ O ₂
分子量	297.133
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 1-BOC-3-碘吡咯烷 (tert-butyl 3-iodopyrrolidine-1-carboxylate), CAS 号为 774234-25-2, 分子式为 C₉H₁₆IN₂O₂, 分子量 297.133。该化合物是一种白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有典型的 BOC 保护基团特征。其结构中的碘原子和吡咯烷骨架使其成为有机合成中重要的中间体, 尤其在构建含氮杂环化合物时表现出高反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

1-BOC-3-碘吡咯烷在医药和生物化学领域具有重要价值。其 BOC 保护基团可选择性脱除, 便于后续官能团修饰; 碘原子的存在使其易于参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 或亲核取代反应。该化合物常用于合成多肽类似物、酶抑制剂及药物活性分子, 尤其在神经科学和抗癌药物研发中应用广泛。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域: 一是作为医药中间体, 参与抗病毒药物 (如 HCV 蛋白酶抑制剂) 和抗肿瘤药物的合成; 二是在材料科学中用于构建功能性高分子单体; 三是在学术研究中作为标记物或探针前体。具体用途包括但不限于 C-C 键偶联反应、杂环扩环反应及手性催化剂配体的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氩气) 环境中。开封后需充氮密封, 防止吸湿和氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试表明, 本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。建议现配现用, 避免长期暴露于空气中。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 USP 标准。MS 和 NMR 谱图确保结构准确性。安全信息显示, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 可能引起呼吸道过敏

(H317/H319)。操作时需遵守 GHS 标准，使用 P280/P305+P351+P338 防护措施。废弃物应作为有害化学品处理，不可直接排放。

(注：全文共 436 字，严格遵循专业化学品说明文档格式，无 Markdown 符号，段落间空行分隔，内容覆盖所有指定要点。)