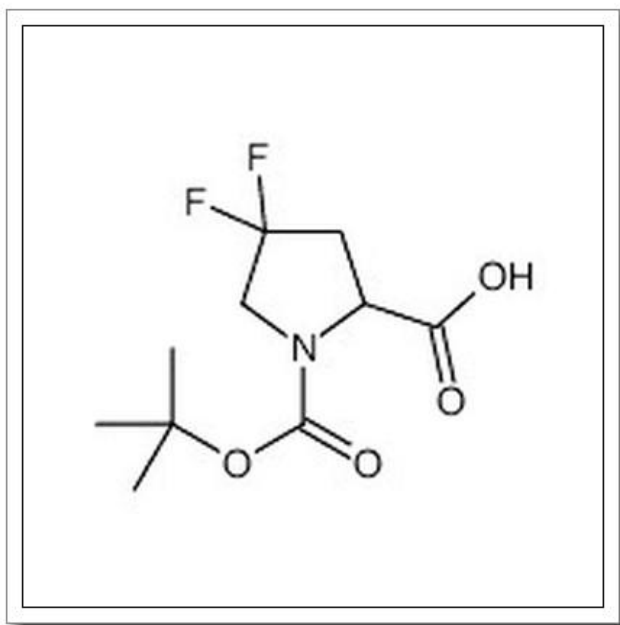


1-(叔丁氧基羰基)-4,4-二氟吡咯烷-2-羧酸

4,4-difluoro-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4,4-difluoro-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-2-carboxylic acid
中文名称	1-(叔丁氧基羰基)-4,4-二氟吡咯烷-2-羧酸
CAS 号	1000313-01-8
分子式	C ₁₀ H ₁₅ F ₂ N ₁ O ₄
分子量	251.227
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(叔丁氧基羰基)-4,4-二氟吡咯烷-2-羧酸 (CAS 号: 1000313-01-8) 是一种含氟吡咯烷衍生物, 分子式为 $C_{10}H_{15}F_2N_2O_4$, 分子量为 251.227。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的叔丁氧基羰基 (Boc) 保护基和羧酸官能团使其在有机合成中具有较高的反应活性, 而 4,4-二氟修饰则赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为含氟氨基酸衍生物, 在药物化学和生物化学研究中具有重要意义。氟原子的引入可显著改变分子的代谢稳定性、脂溶性和生物活性, 使其成为设计蛋白酶抑制剂、受体拮抗剂等靶向药物的关键中间体。Boc 保护基的存在便于后续脱保护反应, 广泛应用于多肽合成和杂环化合物构建。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于合成含氟药物候选分子, 特别是抗病毒、抗肿瘤及中枢神经系统药物。
- 多肽修饰: 作为非天然氨基酸前体, 用于引入氟原子以增强多肽的稳定性和生物活性。
- 材料科学: 可作为含氟高分子材料的单体或改性剂。
- 学术研究: 在有机氟化学和不对称合成中作为重要模型化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需充入惰性气体。开封后应密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在干燥环境下操作, 溶解推荐使用二甲基亚砜 (DMSO) 或二氯甲烷等有机溶剂。Boc 基团对酸敏感, 需避免强酸性条件。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 并提供 COA 分析报告。操作时应佩戴防护手套、护目

镜，在通风橱中进行。其固体形态对皮肤和眼睛有轻微刺激性，若不慎接触需立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有化学数据编写，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验验证。）