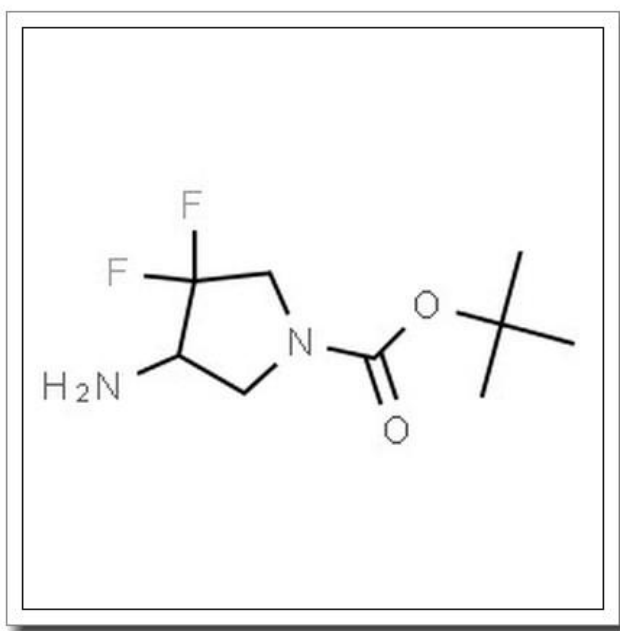


# 2-Methyl-2-propanyl 4-amino-3,3-difluoro-1-pyrrolidinecarboxylate

*2-Methyl-2-propanyl 4-amino-3,3-difluoro-1-pyrrolidinecarboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl 4-amino-3,3-difluoro-1-pyrrolidinecarboxylate
中文名称	2-Methyl-2-propanyl 4-amino-3,3-difluoro-1-pyrrolidinecarboxylate
CAS 号	1408074-83-8
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> F <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	222.232
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-Methyl-2-propanyl 4-amino-3,3-difluoro-1-pyrrolidinecarboxylate 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品是一种含氟吡咯烷羧酸酯衍生物，化学名称为 2-Methyl-2-propanyl 4-amino-3,3-difluoro-1-pyrrolidinecarboxylate，CAS 号为 1408074-83-8。其分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>16</sub>F<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>，分子量为 222.232，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物在常温下为白色至类白色结晶粉末，具有独特的双氟取代结构和叔丁酯保护基团，使其在有机溶剂如 DMSO、甲醇中表现出良好溶解性，但在水中溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷骨架的修饰衍生物，其 4 位氨基和 3,3-双氟取代的立体电子效应，使其成为药物化学中重要的手性砌块。该结构可显著影响分子与生物靶点的相互作用，特别是通过氟原子的强电负性调节化合物的脂溶性和膜穿透能力。在蛋白酶抑制剂设计和 PET 示踪剂开发中具有特殊价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域：一是作为抗病毒药物（如 HCV NS5A 抑制剂）的关键中间体；二是在抗癌药物研发中用于构建靶向激酶的结合域；三是在放射性标记领域用作 <sup>18</sup>F 标记前体。具体使用时建议在惰性气体保护下进行反应，避免氨基氧化。典型反应条件包括钯催化偶联、氨基脱保护及酯基水解等。

#### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20°C、充氮气密封的避光容器中，开封后建议在干燥器内保存。使用前需室温平衡以避免结露，称量应在通风橱中进行。溶解推荐使用无水 DMF 或干燥 DCM，溶液状态在 -20°C 下可稳定保存 72 小时。避免与强氧化剂、酸酐类物质接触。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC（C18 柱，乙腈/水梯度洗脱）检测单一主峰，残留溶剂符合 ICH

Q3C 标准。MS 和  $^1\text{H}$  NMR 谱图可供验证。安全数据表明该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴护目镜和丁腈手套。如发生接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理规定。

（注：本说明基于当前研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化）