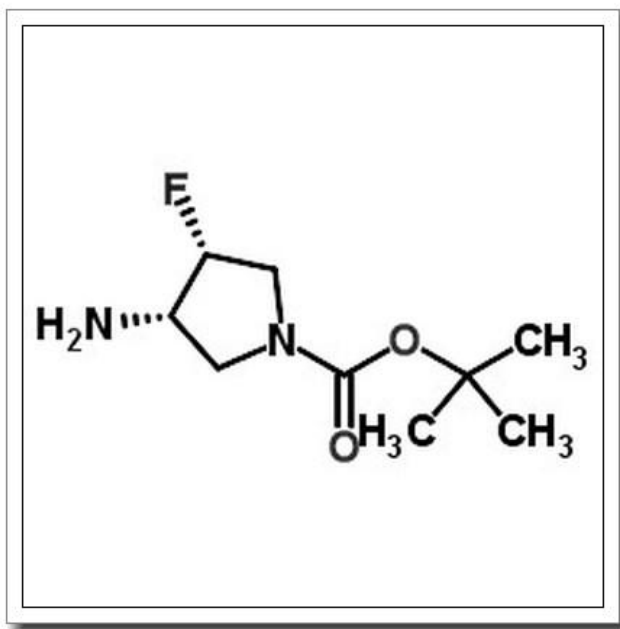


(3S,4r)-3-氨基-4-氟吡咯烷-1-羧酸叔丁酯

(3S, 4R)-tert-Butyl 3-amino-4-fluoropyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3S, 4R)-tert-Butyl 3-amino-4-fluoropyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	(3S, 4r)-3-氨基-4-氟吡咯烷-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1174020-30-4
分子式	C ₉ H ₁₇ FN ₂ O ₂
分子量	204. 242
纯度	>96%

产品说明

(3S, 4R)-3-氨基-4-氟吡咯烷-1-羧酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

(3S, 4R)-3-氨基-4-氟吡咯烷-1-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 1174020-30-4) 是一种具有光学活性的吡咯烷衍生物, 分子式为 $C_9H_{17}FN_2O_2$, 分子量为 204.242。该化合物以叔丁氧羰基 (Boc) 保护氨基, 并在吡咯烷环的 4 位引入氟原子, 形成稳定的手性结构。其纯度高于 96%, 通常为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂 (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

作为含氟手性砌块, 该化合物在药物化学中具有重要价值。氟原子的引入可增强分子的代谢稳定性和脂溶性, 而 Boc 保护基团便于后续选择性脱保护或进一步官能团化。其刚性吡咯烷骨架和手性中心使其成为构建生物活性分子的关键中间体, 尤其在调节化合物与靶标蛋白的立体选择性相互作用中发挥重要作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为合成抗病毒药物 (如 HCV 蛋白酶抑制剂) 和中枢神经系统药物 (如 NK1 受体拮抗剂) 的手性中间体。
- 用于构建含氟杂环化合物库, 支持高通量筛选和结构-活性关系 (SAR) 研究。
- 在不对称催化反应中作为配体或底物, 参与 C-C 键或 C-N 键的立体选择性形成。

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 (如氮气) 以保持稳定性。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试推荐优先使用二氯甲烷或四氢呋喃, 若需水相反应可加入适量助溶剂 (如 DMSO)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $>96\%$, 并符合核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 的结

构确证标准。安全信息如下:

- 可能引起皮肤和眼睛刺激, 接触后需立即用大量清水冲洗。
- 避免吸入粉尘, 操作时需配备防尘口罩。
- 废弃物应按照国家危险化学品规范处置。
- 安全数据表 (SDS) 可随货提供, 请查阅详细毒理学数据及应急处理措施。

注: 本产品仅限科研用途, 不可用于人体或动物实验。