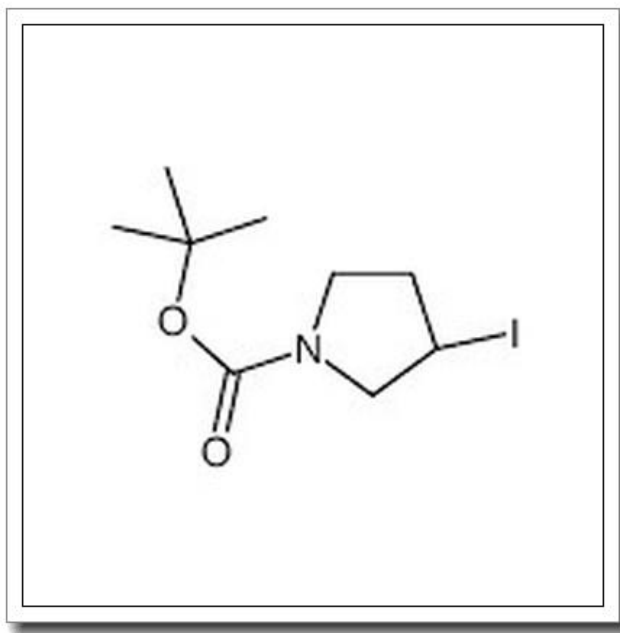


(R)-3-碘吡咯烷-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl (3R)-3-iodopyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl (3R)-3-iodopyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	(R)-3-碘吡咯烷-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1234576-86-3
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

(R)-3-碘吡咯烷-1-羧酸叔丁酯 (化学名称: tert-butyl (3R)-3-iodopyrrolidine-1-carboxylate) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 1234576-86-3, 分子式为 C₉H₁₆INO₂, 分子量为 297.133。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有显著的立体选择性, 其纯度通常超过 96%。作为吡咯烷衍生物, 其结构中的碘原子和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团使其在有机合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学和药物化学领域具有广泛的应用潜力。其手性中心 (R 构型) 使其成为不对称合成中的关键中间体, 常用于构建复杂分子骨架。碘原子的高反应性使其易于参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 或亲核取代反应, 而 Boc 保护基团则提供了氨基的保护与脱保护灵活性, 在肽类和多肽模拟物的合成中尤为重要。

3. 主要应用领域与具体用途

(R)-3-碘吡咯烷-1-羧酸叔丁酯主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为手性砌块, 用于合成抗病毒、抗癌及中枢神经系统药物。
- 有机合成: 参与构建含氮杂环化合物, 如吡咯烷类生物碱或催化剂配体。
- 材料科学: 用于功能化聚合物的修饰或光电材料的制备。

4. 储存条件与使用建议

该化合物需避光保存于 2-8° C 的干燥环境中, 短期使用可置于惰性气体 (如氮气) 保护下。开封后建议尽快使用, 避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜, 避免与皮肤或眼睛接触。溶解性测试显示其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性较差。

5. 质量控制与安全信息

产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 >96%。安全数据表明, 该化合物可能对呼吸道和皮肤有刺激性, 操作时应遵守 GHS 标准, 标识为 GHS05 (腐蚀性) 和

GHS07（刺激性）。废弃物需按危险化学品规范处置。建议在专业化学工作者指导下使用，并参考材料安全数据表（MSDS）获取详细应急处理信息。