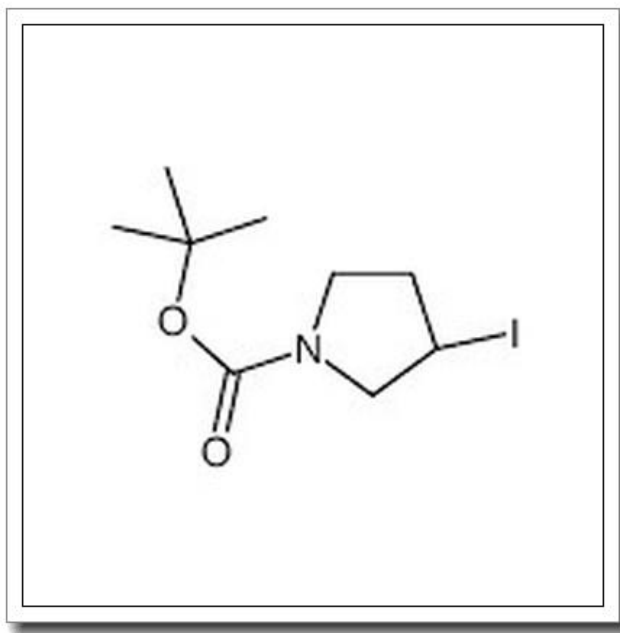


(S)-3-碘-吡咯烷-1-羧酸叔丁酯

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl (3S)-3-iodopyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	(S)-3-碘-吡咯烷-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1234576-81-8
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

(S)-3-碘-吡咯烷-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl (3S)-3-iodopyrrolidine-1-carboxylate) 是一种手性吡咯烷衍生物，其分子式为 C₉H₁₆INO₂，分子量为 297.133。该化合物以叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团修饰，并含有碘取代基，具有较高的反应活性。CAS 号为 1234576-81-8，纯度通常大于 96%，为无色至淡黄色液体或固体，具体形态取决于储存条件。其手性中心位于吡咯烷环的 3 位，使其在不对称合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成中常作为关键中间体，尤其适用于构建手性药物分子或生物活性分子。碘原子的存在使其易于参与偶联反应（如 Suzuki 偶联、Negishi 偶联等），而 Boc 保护基团可在酸性条件下脱除，便于后续官能团化。其在药物化学和材料科学中广泛应用于引入吡咯烷骨架，该骨架常见于多种生物碱和药物分子中。

3. 主要应用领域与具体用途

(S)-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、抗肿瘤或中枢神经系统药物。
- 不对称催化：作为配体或前体参与过渡金属催化反应。
- 材料科学：用于合成功能性高分子或液晶材料。

具体用途包括构建复杂天然产物、修饰多肽链或开发新型催化剂。

4. 储存条件与使用建议

该化合物需避光、密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中，长期暴露于空气或湿气可能导致分解。使用前建议在惰性气体（如氮气或氩气）保护下操作，避免与强氧化剂或强酸接触。溶解时推荐使用无水有机溶剂（如二氯甲烷、四氢呋喃）。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 >96%。安全信息如下：

- 可能对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和防毒面

具。

- 遇热或明火可能释放有毒气体（如碘化氢），应在通风橱中处理。
- 废弃物需按危险化学品规范处置。

如需进一步技术数据（如 MSDS 或 COA），请联系供应商获取。