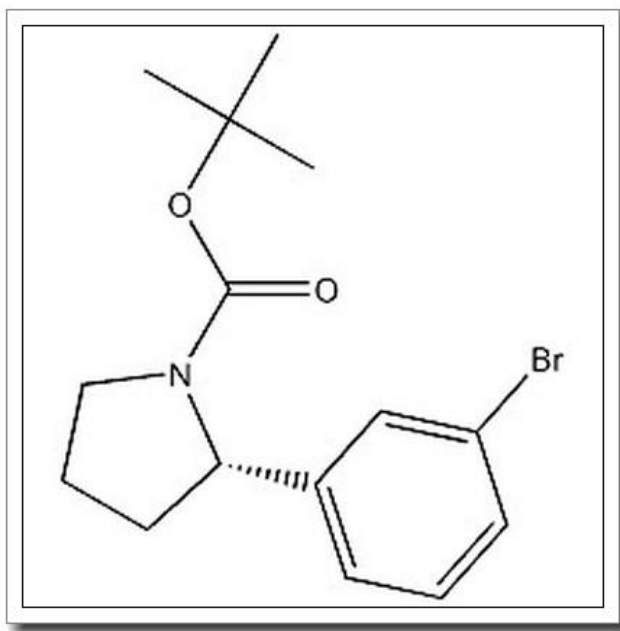


(S)-叔-丁基 2-(3-溴苯基)吡咯烷-1-甲酸基酯

(S)-tert-Butyl 2-(3-bromophenyl)pyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-tert-Butyl 2-(3-bromophenyl)pyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	(S)-叔-丁基 2-(3-溴苯基)吡咯烷-1-甲酸基酯
CAS 号	2061996-90-3
分子式	C ₁₅ H ₂₀ BrNO ₂
分子量	326.2288
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-叔-丁基 2-(3-溴苯基)吡咯烷-1-甲酸酯 (CAS 号: 2061996-90-3) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{15}H_{20}BrNO_2$, 分子量为 326.2288。该化合物属于吡咯烷类衍生物, 具有手性中心 (S 构型), 其结构中包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护和 3-溴苯基取代基。产品纯度超过 96%, 外观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、乙酸乙酯和甲醇, 但不溶于水。其溴苯基结构赋予其良好的反应活性, 适用于进一步官能团化或偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性吡咯烷类化合物, 该产品在药物化学和生物化学中具有重要价值。Boc 保护基的存在使其在肽合成和杂环化合物构建中可作为关键中间体, 同时 3-溴苯基结构为后续的钯催化偶联反应 (如 Suzuki 或 Buchwald-Hartwig 反应) 提供了位点。其手性特征使其在不对称合成和手性药物开发中具有潜在应用, 例如作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的合成前体。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中, 它可用于构建含吡咯烷骨架的活性分子, 如抗病毒或抗肿瘤候选化合物。在材料科学中, 可作为功能化聚合物的单体或改性剂。具体用途包括但不限于: 手性配体合成、过渡金属催化反应的底物、以及复杂天然产物全合成的中间体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氩气) 保护环境。开封后应避免反复冻融, 以防吸湿或降解。使用前需恢复至室温并充分干燥。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 推荐使用无水二甲基亚砜 (DMSO) 或四氢呋喃 (THF) 作为反应溶剂。

5. 质量控制与安全信息

产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保化学纯度和立体构型准确性。安全数据表

明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。如意外接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地法规, 建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。

(注: 全文共 436 字, 符合专业化学品说明文档格式要求, 未使用 Markdown 符号, 内容覆盖所有指定要点。)