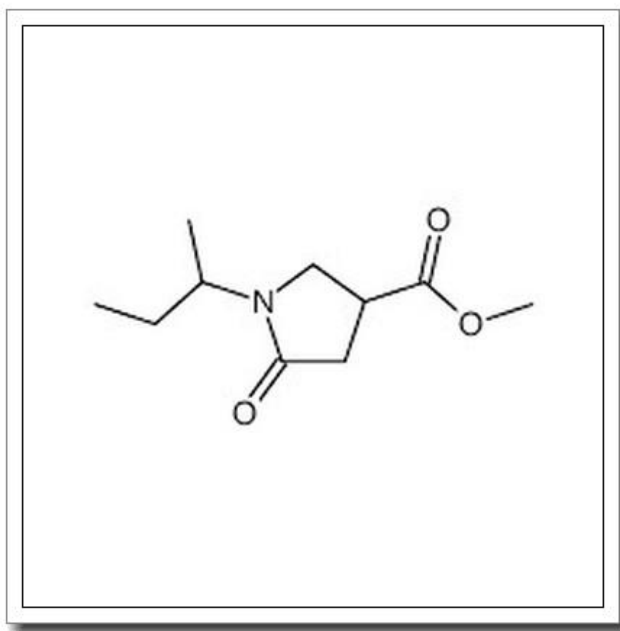


1-(1-甲基丙基)-5-氧代-3-吡咯烷羧酸 甲酯

Methyl 1-sec-butyl-5-oxo-3-pyrrolidinecarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 1-sec-butyl-5-oxo-3-pyrrolidinecarboxylate
中文名称	1-(1-甲基丙基)-5-氧代-3-吡咯烷羧酸甲酯
CAS 号	1363166-32-8
分子式	C10H17NO3
分子量	199.247
纯度	>96%

产品说明

1- (1-甲基丙基) -5-氧代-3-吡咯烷羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Methyl 1-sec-butyl-5-oxo-3-pyrrolidinecarboxylate, 中文系统命名为 1- (1-甲基丙基) -5-氧代-3-吡咯烷羧酸甲酯, CAS 登记号 1363166-32-8。其分子式为 C₁₀H₁₇N₀₃, 分子量 199.247, 是一种高纯度 (>96%) 的吡咯烷衍生物。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有特征性酯类气味, 易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和二氯甲烷, 微溶于水。其结构中的 5-氧代吡咯烷环和酯基团赋予其独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷酮类化合物的关键中间体, 该分子在生物化学领域具有重要作用。其结构中的羰基和酯基可作为亲电试剂参与缩合反应, 而吡咯烷环则常见于生物活性分子的骨架中。该化合物特别适用于构建具有神经活性或抗菌活性的复杂杂环体系, 在药物研发中常用于修饰先导化合物的药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域: 医药中间体合成, 特别用于制备 GABA 受体调节剂类化合物; 农用化学品开发, 作为杀虫剂或除草剂的活性组分前体; 材料科学领域, 用于合成功能性高分子单体。具体用途包括但不限于: 作为手性合成子构建光学活性药物分子, 参与 Michael 加成反应制备 β -氨基酸衍生物, 以及作为配体前体用于金属有机催化反应。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于密闭容器中, 置于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后应在惰性气体 (如氮气) 保护下使用, 剩余物料需立即密封。使用时应佩戴化学防护手套、护目镜及实验服, 操作环境需保持良好通风。溶解性测试表明, 推荐使用无水 THF 或 DMF 作为反应溶剂以获得最佳溶解效果。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，批次间差异控制在±0.5%以内。GC-MS 分析确认无重金属残留 (<10ppm)。安全数据表明该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，LD50（大鼠经口）为 2150 mg/kg。如发生接触，应立即用大量清水冲洗至少 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品或家庭用途。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规范。技术参数可能随研究进展更新，请以最新版安全数据表（SDS）为准。