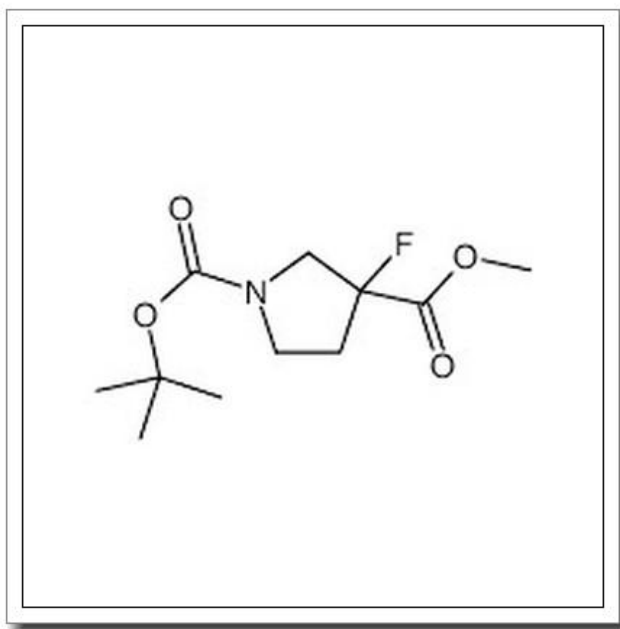


1-O-tert-butyl 3-O-methyl 3-fluoropyrrolidine-1,3-dicarboxylate

1-O-tert-butyl 3-O-methyl 3-fluoropyrrolidine-1,3-dicarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-O-tert-butyl 3-O-methyl 3-fluoropyrrolidine-1,3-dicarboxylate
中文名称	1-O-tert-butyl 3-O-methyl 3-fluoropyrrolidine-1,3-dicarboxylate
CAS 号	942189-96-0
分子式	C ₁₁ H ₁₈ FNO ₄
分子量	247.263
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-O-tert-butyl 3-O-methyl 3-fluoropyrrolidine-1,3-dicarboxylate (CAS 号: 942189-96-0) 是一种含氟吡咯烷衍生物, 分子式为 $C_{11}H_{18}FN_2O_4$, 分子量为 247.263。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%, 具有明确的立体化学结构。其分子结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 和甲氧羰基 (MeO) 保护基团, 以及 3 位氟原子的引入, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性与稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的医药中间体, 其氟原子和吡咯烷骨架在药物设计中具有显著价值。氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性、脂溶性和生物利用度, 而吡咯烷结构广泛存在于生物活性分子中。因此, 该产品在开发抗病毒、抗肿瘤及中枢神经系统药物中具有潜在应用前景。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于有机合成和药物研发领域, 具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成含氟吡咯烷类化合物, 如蛋白酶抑制剂或激酶抑制剂。
- 用于构建手性药物分子骨架, 通过进一步官能团化修饰获得高活性候选药物。
- 在放射性标记或荧光标记探针的合成中作为前体化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照与潮湿。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 以防止降解。使用时应在通风良好的实验室环境中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱分析严格质量控制, 确保纯度 $>96\%$ 。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜

及防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

如需进一步技术资料或 COA（分析证书），请联系供应商获取。