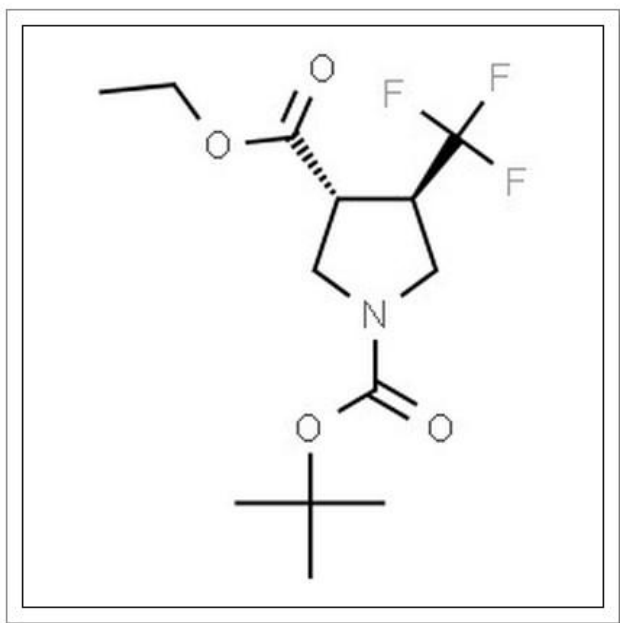


# 1-叔丁基 3-乙基反式-4-(三氟甲基)吡咯烷-1,3-二羧酸酯

*1-(tert-butyl) 3-ethyl (3S, 4S)-4-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1, 3-dicarboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(tert-butyl) 3-ethyl (3S, 4S)-4-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1, 3-dicarboxylate
中文名称	1-叔丁基 3-乙基反式-4-(三氟甲基)吡咯烷-1, 3-二羧酸酯
CAS 号	1428776-53-7
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> F <sub>3</sub> N <sub>1</sub> O <sub>4</sub>
分子量	311.3
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-叔丁基 3-乙基反式-4-(三氟甲基)吡咯烷-1,3-二羧酸酯 (CAS 号: 1428776-53-7) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为  $C_{13}H_{20}F_3N_2O_4$ , 分子量为 311.3。该化合物为无色至淡黄色液体或固体, 具有特定的立体构型 (3S, 4S), 其结构中包含三氟甲基和双羧酸酯基团, 赋予其独特的化学性质。纯度高于 96%, 适合用于精细有机合成和药物研发。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡咯烷衍生物, 在生物化学领域具有重要作用。其三氟甲基和双羧酸酯结构使其成为药物分子设计中的关键中间体, 尤其在调节生物活性和代谢稳定性方面表现突出。其立体构型对与生物靶标的特异性结合至关重要, 常用于手性药物和生物活性分子的合成。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为手性砌块用于抗病毒药物、抗肿瘤药物及中枢神经系统药物的合成; 作为催化剂或配体参与不对称合成反应; 在农药化学中用于开发高效低毒的新型农药。其高纯度和特定构型确保了其在复杂合成中的可靠性和重复性。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 以保持稳定性。使用前需恢复至室温并避免接触湿气。操作时应在通风良好的环境中佩戴防护手套和护目镜, 避免直接吸入或接触皮肤。溶解性测试表明其易溶于有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 可根据实验需求选择合适的溶剂。

### 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  $>96\%$ 。安全信息方面, 该化合物可能存在刺激性, 需遵循化学品通用操作规范。如不慎接触皮肤或眼睛, 应立即用大量

清水冲洗并就医。废弃物应按照有机溶剂和含氟化合物的处置规范处理。提供材料安全数据表（MSDS）以供进一步参考。