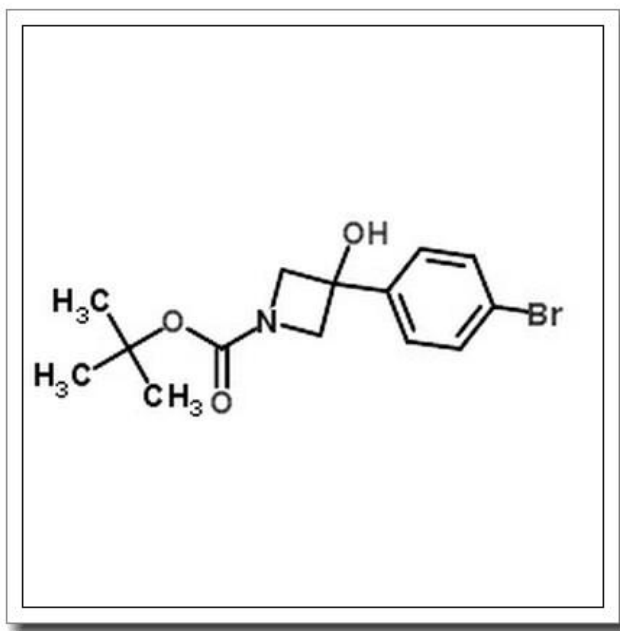


# 3-(4-溴苯基)-3-羟基氮杂环丁烷-1-甲酸叔丁酯

*2-Methyl-2-propanyl 3-(4-bromophenyl)-3-hydroxy-1-azetidinecarboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl 3-(4-bromophenyl)-3-hydroxy-1-azetidinecarboxylate
中文名称	3-(4-溴苯基)-3-羟基氮杂环丁烷-1-甲酸叔丁酯
CAS 号	1357614-50-6
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> BrNO <sub>3</sub>
分子量	328.202
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-甲基-2-丙基 3-(4-溴苯基)-3-羟基-1-氮杂环丁烷羧酸酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-methyl-2-propanyl 3-(4-bromophenyl)-3-hydroxy-1-azetidinedicarboxylate (CAS 1357614-50-6)，中文命名为 3-(4-溴苯基)-3-羟基氮杂环丁烷-1-甲酸叔丁酯，是一种高纯度有机溴化物。其分子式为  $C_{14}H_{18}BrNO_3$ ，分子量 328.202，常温下呈白色至类白色结晶粉末。该化合物含氮杂环丁烷骨架和溴代苯基团，具有显著的空间位阻效应和手性中心，适合作为手性合成砌块或医药中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为氮杂环丁烷衍生物，其结构中的羟基和羧酸酯基团赋予分子两亲性，可参与亲核取代、酯水解等反应。溴原子的引入增强了化合物的电子亲和性，使其在过渡金属催化偶联反应（如 Suzuki 反应）中具有重要价值。该分子在  $\beta$ -内酰胺类抗生素类似物合成、神经递质调节剂开发等领域展现出潜在生物活性。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和精细化工领域：

- 3.1 医药中间体：用于构建含氮杂环的靶向药物分子，尤其适用于抗感染和中枢神经系统药物研发。
- 3.2 不对称合成：作为手性助剂参与立体选择性合成，制备光学活性化合物。
- 3.3 材料科学：可作为液晶材料或高分子单体的功能化前体。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  干燥环境，惰性气体保护可延长稳定性。溶解建议使用无水 DMF 或二氯甲烷，避免与强氧化剂、酸碱物质共同存放。实验操作需在通风橱中进行，建议现配现用以防止水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $>96\%$ ，水分含量  $<0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据

表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜。急性毒性 LD50（大鼠口服）>500 mg/kg，属于非剧毒物质但仍需避免吸入粉尘。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理法规。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，本说明数据基于实验室级样品检测结果，批量生产时参数可能存在工艺偏差。