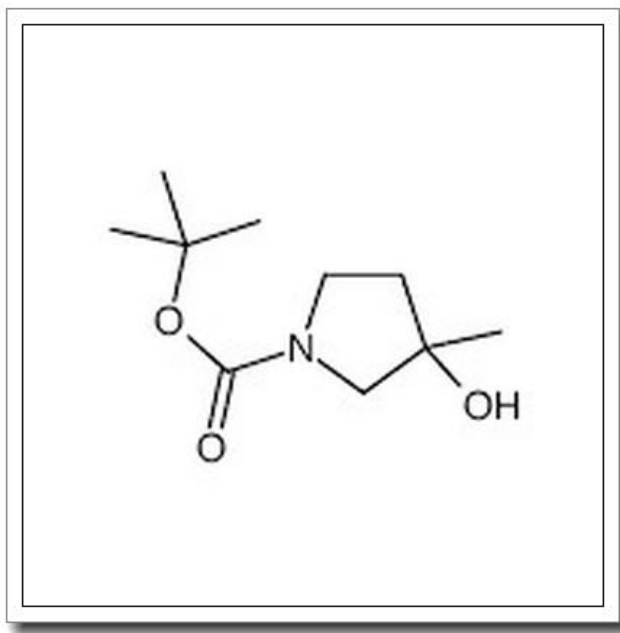


3-羟基-3-甲基吡咯烷-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 3-hydroxy-3-methylpyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-hydroxy-3-methylpyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	3-羟基-3-甲基吡咯烷-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	412278-02-5
分子式	C ₁₀ H ₁₉ N ₃ O
分子量	201.263
纯度	>96%

产品说明

3-羟基-3-甲基吡咯烷-1-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-羟基-3-甲基吡咯烷-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 3-hydroxy-3-methylpyrrolidine-1-carboxylate) 是一种重要的吡咯烷衍生物，化学式为 C₁₀H₁₉N₃O₃，分子量 201.263，CAS 号为 412278-02-5。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度通常高于 96%。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和羟基官能团使其成为有机合成中关键的手性中间体，尤其在医药和农药领域具有广泛应用。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷类化合物，该产品在生物活性分子构建中扮演重要角色。羟基和 Boc 保护基的存在使其易于参与缩合、取代等反应，常用于合成具有生物活性的杂环化合物。其结构特性可用于调节分子的脂溶性和空间位阻，在药物设计中优化药代动力学性质，例如作为蛋白酶抑制剂或受体调节剂的合成前体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药中间体、农药化学及材料科学领域。在医药研发中，常用于抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）和中枢神经系统药物的合成。在农药领域，可作为杀菌剂或杀虫剂的结构模块。此外，其衍生物还可用于功能材料（如液晶或高分子单体）的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 干燥避光条件下储存，长期保存需充惰性气体（如氮气）保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该产品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保纯度 > 96%。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若不

慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）