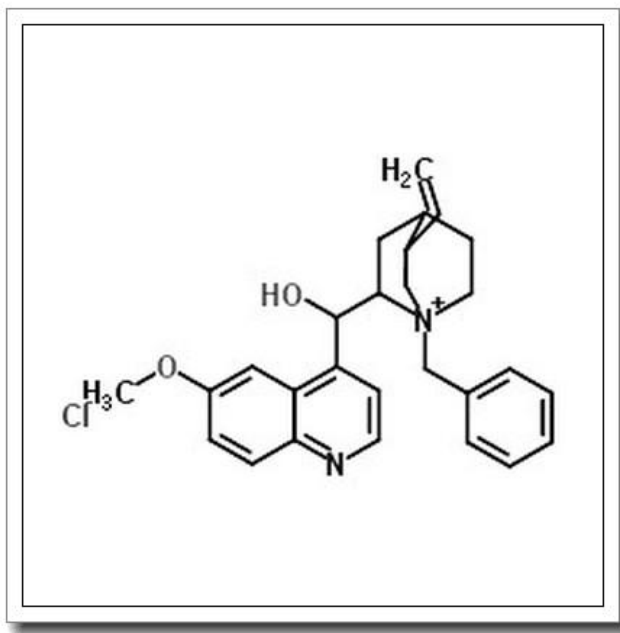


# N-苄基氯化喹啉

*N-Benzylquinidinium Chloride [Chiral Phase-Transfer Catalyst]*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	N-Benzylquinidinium Chloride [Chiral Phase-Transfer Catalyst]
中文名称	N-苄基氯化喹啉
CAS 号	77481-82-4
分子式	C <sub>27</sub> H <sub>31</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	451
纯度	>96%

## 产品说明

### N-苄基氯化喹啉产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

N-苄基氯化喹啉 (N-Benzylquinidinium Chloride) 是一种手性相转移催化剂，化学式为  $C_{27}H_{31}ClN_2O_2$ ，分子量 451.00，CAS 号为 77481-82-4。该化合物以喹啉生物碱骨架为核心，通过苄基修饰增强其催化活性和立体选择性。外观通常为白色至类白色结晶性粉末，纯度  $\geq 96\%$  (HPLC 测定)，易溶于极性有机溶剂如甲醇、乙腈，微溶于水。其结构中的季铵盐特性使其在非均相反应中表现出优异的相转移能力。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为手性相转移催化剂，该产品能高效促进不对称合成反应，特别是对碳-碳键或碳-杂原子键的形成具有显著立体控制作用。其喹啉环与苄基的协同作用可稳定过渡态，降低反应活化能，同时通过空间位阻效应诱导对映选择性，在制备光学活性化合物中至关重要。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于制药和精细化工领域的不对称合成，包括但不限于以下反应： $\alpha$ -烷基化反应、Michael 加成、Darzens 缩合等。典型用例为手性药物中间体（如  $\beta$ -氨基酸衍生物）的规模化生产，以及天然产物全合成中的关键步骤。其高对映选择性（通常  $>90\%$  ee）可显著减少后续拆分步骤的成本。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度  $2-8^{\circ}C$  冷藏保存。使用前需在干燥环境下平衡至室温，避免反复冻融。推荐反应溶剂为无水二氯甲烷或甲苯，反应体系需严格除氧。催化剂用量通常为底物的 1-5 mol%，具体需通过预实验优化。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：急性毒性（口服，大鼠  $LD_{50}$ ） $>500$  mg/kg，操作时需佩戴防护手套及护目镜。若接

触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）