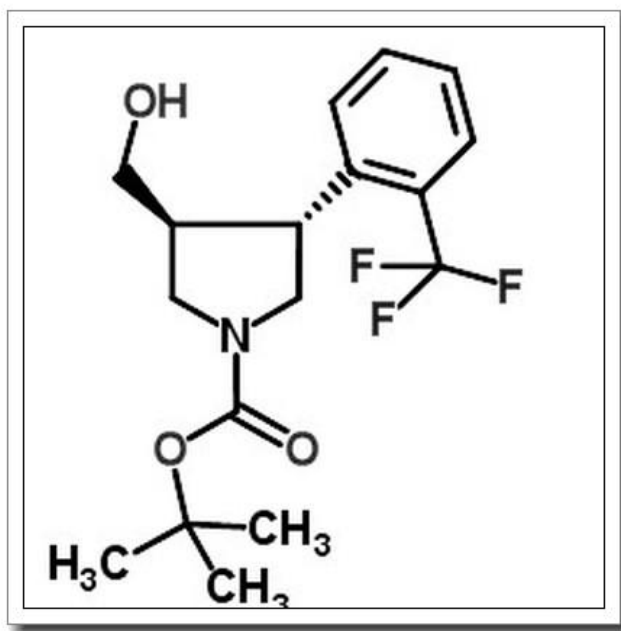


tert-Butyl (3S,4R)-3-(hydroxymethyl)-4-[2-(trifluoromethyl)phenyl]pyrrolidine-1-carboxylate

tert-Butyl (3S, 4R)-3-(hydroxymethyl)-4-[2-(trifluoromethyl)phenyl]pyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl (3S, 4R)-3-(hydroxymethyl)-4-[2-(trifluoromethyl)phenyl]pyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	tert-Butyl (3S, 4R)-3-(hydroxymethyl)-4-[2-(trifluoromethyl)phenyl]pyrrolidine-1-carboxylate
CAS 号	1186647-92-6
分子式	C ₁₇ H ₂₂ F ₃ N ₃ O ₃
分子量	345.357

纯度	>96%
----	------

产品说明

产品名称: tert-Butyl (3S, 4R)-3-(hydroxymethyl)-4-[2-(trifluoromethyl)phenyl]pyrrolidine-1-carboxylate

CAS 号: 1186647-92-6

分子式: C₁₇H₂₂F₃N₃O₃

分子量: 345.357

纯度: >96%

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，是一种具有立体选择性的吡咯烷衍生物，分子结构中包含叔丁氧羰基（Boc）保护基、羟甲基以及 2-三氟甲基苯基取代基。其 (3S, 4R) 立体构型在药物化学中具有重要价值。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、甲醇等，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性吡咯烷类化合物，本品是合成生物活性分子的关键中间体，尤其适用于构建含三氟甲基的药物分子。三氟甲基的引入可显著改善化合物的脂溶性、代谢稳定性和靶标结合能力，因此在抗病毒、抗肿瘤及中枢神经系统药物研发中具有广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 用于合成蛋白酶抑制剂、GPCR 靶向药物等，特别是针对 HIV、HCV 等病毒性疾病的候选药物。
- 有机合成: 作为手性砌块参与不对称合成，构建复杂杂环体系。
- 材料科学: 用于开发具有特殊光学性能的功能材料。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 密封保存于 -20° C 干燥环境中，避免光照与湿气。
- 使用建议: 建议在惰性气体（如氮气）保护下操作，溶解时优先选用无水溶剂。开封后需尽快使用，剩余产品应重新充氮密封。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（NMR）与质谱（MS）验证结构。
- 安全信息：本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品规范处置。

（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实验验证。）