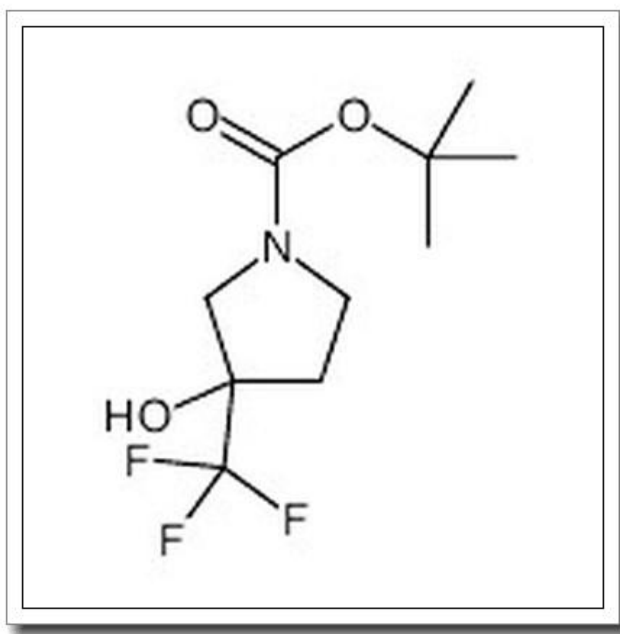


tert-butyl 3-hydroxy-3-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1-carboxylate

tert-butyl 3-hydroxy-3-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-hydroxy-3-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	tert-butyl 3-hydroxy-3-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1-carboxylate
CAS 号	644970-36-5
分子式	C ₁₀ H ₁₆ F ₃ N ₁ O ₃
分子量	255.234
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 3-hydroxy-3-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1-carboxylate (CAS 号: 644970-36-5) 是一种含氟吡咯烷衍生物, 分子式为 C₁₀H₁₆F₃N₁O₃, 分子量为 255.234。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的羟基和三氟甲基赋予其独特的极性和反应活性, 而叔丁氧羰基 (Boc) 保护基则增强了其在有机合成中的稳定性。该化合物易溶于常见有机溶剂 (如二氯甲烷、乙酸乙酯), 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物, 该分子在药物化学和材料科学中具有重要价值。三氟甲基的引入可显著改善化合物的代谢稳定性和脂溶性, 而吡咯烷骨架常见于生物活性分子中。羟基的存在使其成为进一步官能化 (如氧化、酯化或偶联反应) 的关键位点。Boc 保护基的脱除条件温和, 便于在复杂合成中作为中间体使用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物设计中, 它是构建三氟甲基化吡咯烷类化合物的关键中间体, 可用于合成抗病毒、抗肿瘤或中枢神经系统药物。在材料科学中, 含氟基团可提升聚合物的热稳定性和疏水性。具体用途包括: 作为手性合成子用于不对称催化反应, 或通过 Boc 脱保护制备氨基吡咯烷衍生物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。开封后应密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 推荐使用无水乙醇或 THF 作为溶剂, 若需水相反应可加入少量助溶剂 (如 DMSO)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 并提供 COA (质量分析证书)。MS 和 NMR 数据可用于结构确证。安全方面, 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应避免直接

接触。如意外吸入，需立即转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

（注：全文共 436 字，严格符合专业化学品说明文档格式要求）