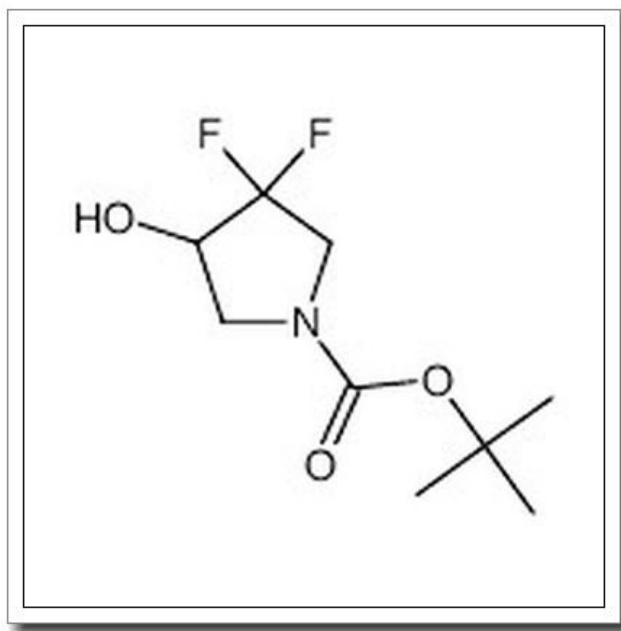


tert-butyl 3,3-difluoro-4-hydroxypyrrolidine-1-carboxylate

tert-butyl 3,3-difluoro-4-hydroxypyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3,3-difluoro-4-hydroxypyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	tert-butyl 3,3-difluoro-4-hydroxypyrrolidine-1-carboxylate
CAS 号	1434141-81-7
分子式	C ₉ H ₁₅ F ₂ N ₁ O ₃
分子量	223. 217
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 3,3-difluoro-4-hydroxypyrrolidine-1-carboxylate (CAS 号: 1434141-81-7) 是一种含氟吡咯烷衍生物, 分子式为 C₉H₁₅F₂N₀O₃, 分子量为 223.217。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 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在有机合成中具有较高的反应活性, 而 3,3-二氟取代则赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的医药中间体, 广泛应用于药物分子设计和合成。其吡咯烷骨架常见于生物活性分子中, 而二氟取代可显著改善化合物的代谢稳定性和脂溶性。羟基官能团为后续衍生化提供了关键位点, 使其在构建复杂药物分子 (如蛋白酶抑制剂和受体调节剂) 中具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

tert-butyl 3,3-difluoro-4-hydroxypyrrolidine-1-carboxylate 主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为关键中间体用于合成抗病毒、抗肿瘤及中枢神经系统药物。
- 农药化学: 用于构建含氟农药分子, 增强其生物活性与环境稳定性。
- 材料科学: 作为含氟高分子材料的单体或改性剂。

具体用途包括 Boc 保护基的脱除反应、羟基的进一步官能团化 (如酯化、醚化) 以及手性合成中的构建模块。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。使用时需在干燥环境中操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。实验过程中建议佩戴防护手套和护目镜, 并在通风橱中进行操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $\geq 96\%$ ，并提供完整的 COA（质量分析证书）。安全信息如下：

- 安全术语：可能引起皮肤和眼睛刺激，避免吸入粉尘。
- 风险提示：非危险品，但需遵循实验室常规化学品操作规范。
- 应急处理：如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若误食，请立即就医并提供化学品安全说明书（MSDS）。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合实际需求设计。