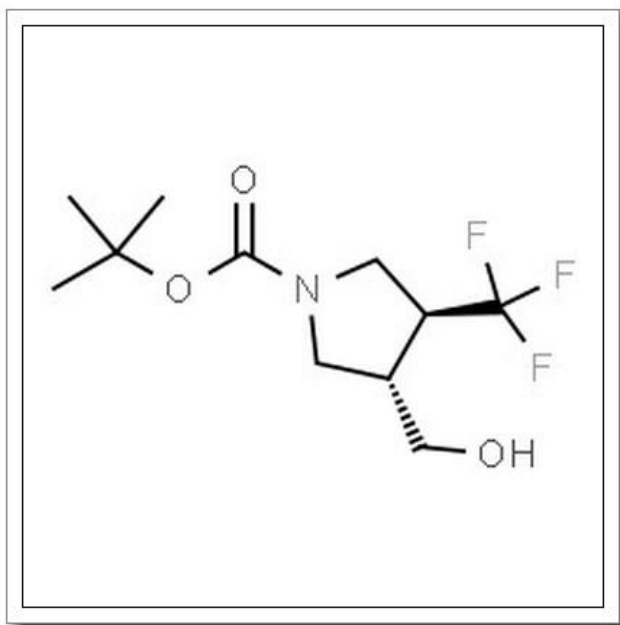


反式-3-(羟甲基)-4-(三氟甲基)吡咯烷-1-羧酸叔丁酯

trans-tert-butyl 3-(hydroxymethyl)-4-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	trans-tert-butyl 3-(hydroxymethyl)-4-(trifluoromethyl)pyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	反式-3-(羟甲基)-4-(三氟甲基)吡咯烷-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1817633-15-0
分子式	C ₁₁ H ₁₈ F ₃ N ₁ O ₃
分子量	269.26
纯度	>96%

产品说明

反式-3-(羟甲基)-4-(三氟甲基)吡咯烷-1-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 1817633-15-0) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{11}H_{18}F_3NO_3$, 分子量为 269.26。该化合物为白色至类白色固体, 纯度超过 96%, 具有显著的化学稳定性和良好的溶解性, 适用于多种有机合成反应。其结构中的三氟甲基和羟甲基官能团赋予其独特的反应活性, 使其在药物化学和材料科学领域具有重要价值。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于吡咯烷衍生物, 反式构型确保了其立体化学的明确性。叔丁氧羰基 (Boc) 保护基的存在增强了其在酸性条件下的稳定性, 而羟甲基和三氟甲基的引入使其成为多功能合成砌块。其熔点和沸点数据可通过实验测定, 建议在干燥惰性气体环境下保存以避免降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性吡咯烷骨架的衍生物, 该化合物在生物活性分子设计中具有广泛应用。三氟甲基的强电负性可调节分子的脂溶性和代谢稳定性, 而羟甲基提供了进一步官能团化的位点。这些特性使其成为药物研发中构建中枢神经系统药物和抗感染剂的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 医药中间体: 用于合成具有生物活性的吡咯烷类化合物, 如蛋白酶抑制剂和受体调节剂。
- 材料科学: 作为含氟高分子材料的单体或改性剂。
- 不对称催化: 作为手性配体的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存, 开封后需充入惰性气体并密封。使用前应在干燥环境下恢复至室温, 避免接触水分和强氧化剂。实验操作应在通风良好的环境下进行, 并佩戴适当的防护装备。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 >96%，批次间质量稳定。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如发生接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。

本产品仅供科研用途，不适用于食品、药品或家庭用途。使用者应具备专业化学知识并遵守相关实验室安全规程。