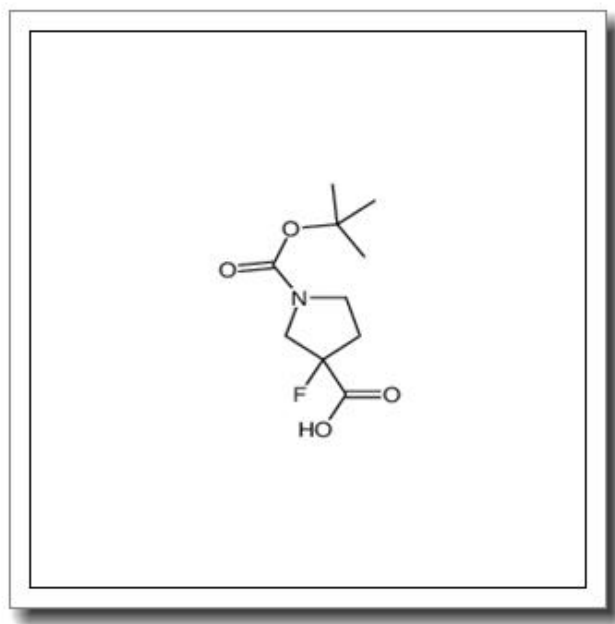


1-(叔丁氧羰基)-3-氟吡咯烷-3-甲酸

3-fluoro-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-fluoro-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]pyrrolidine-3-carboxylic acid
中文名称	1-(叔丁氧羰基)-3-氟吡咯烷-3-甲酸
CAS 号	1001754-59-1
分子式	C ₁₀ H ₁₆ FN ₀₄
分子量	233. 237
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(叔丁氧羰基)-3-氟吡咯烷-3-甲酸 (CAS 号: 1001754-59-1) 是一种含氟吡咯烷衍生物, 分子式为 $C_{10}H_{16}FN_2O_4$, 分子量为 233.237。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有稳定的化学性质。其结构中的叔丁氧羰基

(Boc) 保护基和羧酸官能团使其在有机合成中具有较高的反应活性, 而氟原子的引入可显著改变分子的电子效应和生物活性。

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, 其 Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除, 为吡咯烷骨架的进一步修饰提供便利。氟原子的引入通常能增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 因此在药物设计中常用于优化先导化合物的药代动力学特性。其在生物活性分子构建中扮演关键角色, 尤其适用于神经递质类似物或酶抑制剂的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和精细化工领域, 具体用途包括:

- 作为合成抗肿瘤、抗病毒或中枢神经系统药物 (如 NK1 受体拮抗剂) 的关键中间体
- 用于构建含氟杂环化合物库, 支持高通量药物筛选
- 在不对称催化反应中作为手性助剂或配体组分
- 作为荧光标记物或生物探针的合成前体

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体。开封后需在干燥环境中尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该产品易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 在水溶液中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 同时提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 分析报

告。安全数据表明,该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激,操作时应佩戴防护手套和护目镜。如意外接触,需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例,建议通过专业机构进行无害化处理。