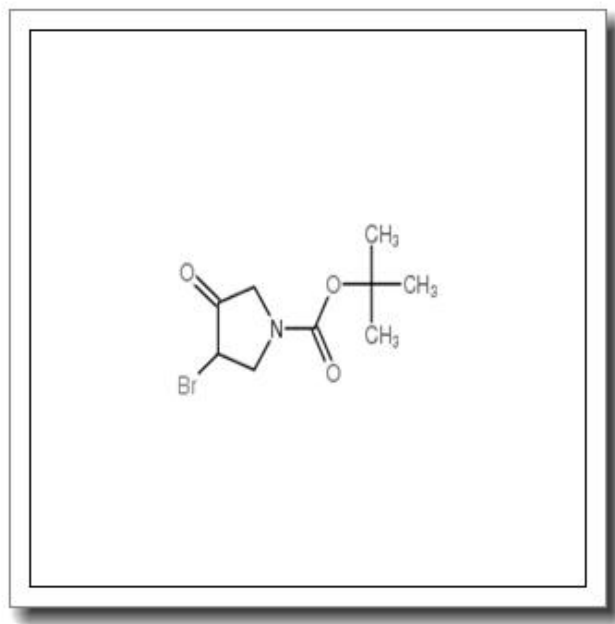


3-溴-4-氧-吡咯烷-1-甲酸叔丁酯

tert-butyl 3-bromo-4-oxopyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-bromo-4-oxopyrrolidine-1-carboxylate
中文名称	3-溴-4-氧-吡咯烷-1-甲酸叔丁酯
CAS 号	885278-03-5
分子式	C ₉ H ₁₄ BrNO ₃
分子量	264.116
纯度	≥96%

产品说明

3-溴-4-氧-吡咯烷-1-甲酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-4-氧-吡咯烷-1-甲酸叔丁酯 (CAS 号: 885278-03-5) 是一种高纯度有机溴化物, 分子式为 $C_9H_{14}BrNO_3$, 分子量 264.116。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 常温下稳定, 易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。其结构中的溴原子和羰基赋予其高反应活性, 可作为关键中间体用于杂环化合物的合成。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷衍生物, 该化合物在生物活性分子构建中具有重要作用。溴原子的存在使其易于参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联), 而叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团可选择性脱除, 为后续官能团修饰提供便利。其在药物化学中常用于构建含氮杂环骨架, 是合成蛋白酶抑制剂、抗菌剂等活性分子的重要前体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和精细化工领域。具体用途包括: 1) 作为抗肿瘤药物 (如激酶抑制剂) 的中间体; 2) 用于合成具有神经保护作用的吡咯烷类化合物; 3) 在材料科学中构建功能性高分子单体。实验显示, 其衍生物对多种酶靶点具有调节活性。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8°C 干燥环境中, 避免光照和湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 推荐使用无水 DMF 或乙腈作为反应溶剂以获得最佳溶解效果。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明, 其 LD50 (大鼠口服) $> 2000\text{mg/kg}$, 但仍需按有害化学品规范处理。操作时需佩戴护目镜和防化手套, 若接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为卤代有机废物处置, 符合当地环保法规。

本产品仅供科研用途，不适用于食品或医疗直接应用。具体实验方案建议参考
文献: J. Med. Chem. 2015, 58(3), 1308-1325.