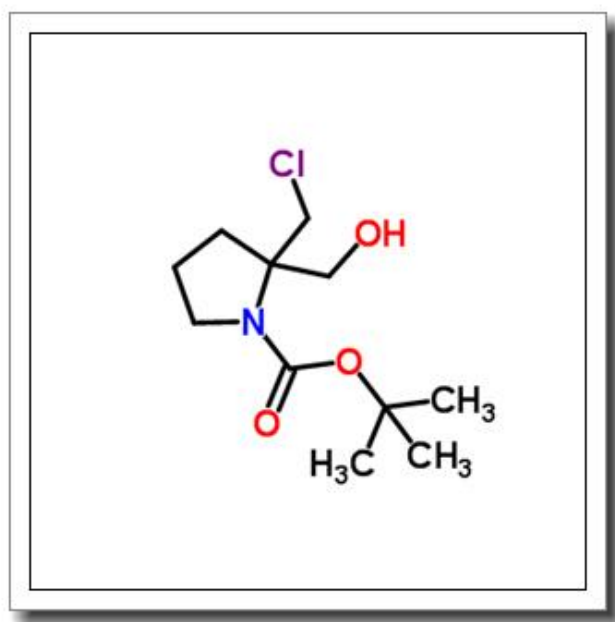


产品_7016

2-Methyl-2-propanyl 2-(chloromethyl)-2-(hydroxymethyl)-1-pyrrolidinecarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl 2-(chloromethyl)-2-(hydroxymethyl)-1-pyrrolidinecarboxylate
中文名称	产品_7016
CAS 号	1415564-60-1
分子式	C ₁₁ H ₂₀ ClN ₃ O ₃
分子量	249.734
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-Methyl-2-propanyl 2-(chloromethyl)-2-(hydroxymethyl)-1-pyrrolidinecarboxylate, 中文名称标注为产品_7016, CAS 号为 1415564-60-1。其分子式为 $C_{11}H_{20}ClN_1O_3$, 分子量为 249.734, 纯度标准为 $\geq 96\%$ 。该化合物是一种吡咯烷羧酸酯衍生物, 结构中同时含有氯甲基和羟甲基官能团, 具有较高的反应活性。其外观通常为无色至淡黄色液体或固体, 具体形态取决于储存条件。该产品在有机合成中可作为重要的中间体, 尤其适用于构建复杂杂环结构。

2. 生物化学功能与重要性

产品_7016 在生物化学领域主要作为手性合成砌块, 其吡咯烷骨架是多种生物活性分子的核心结构。氯甲基和羟甲基的共存使其能够通过选择性反应参与碳-碳键或碳-杂原子键的形成, 在药物研发中常用于构建蛋白酶抑制剂或受体调节剂的药效团。其立体中心的存在也为不对称合成提供了可能, 在制备光学活性化合物时具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药中间体合成、材料科学及精细化工领域。在医药研发中, 常用于抗病毒药物 (如 HCV 蛋白酶抑制剂) 和神经系统药物的结构修饰。在材料领域, 可作为功能化聚合物的交联剂或改性剂。具体实验用途包括: 1) 作为亲电试剂参与 N-烷基化反应; 2) 通过羟基衍生化制备酯类或醚类衍生物; 3) 在过渡金属催化下构建稠环体系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 条件下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气或氩气) 下操作, 因其对湿气和空气敏感。溶解性测试表明, 该产品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。实验操作建议佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保批次间稳定性。安全数据表明，该化合物可能引起皮肤和眼睛刺激，操作时应避免直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。提供完整的 MSDS 报告，包含毒理学数据和应急处理措施。运输分类为 UN2810，需符合危险化学品运输规范。