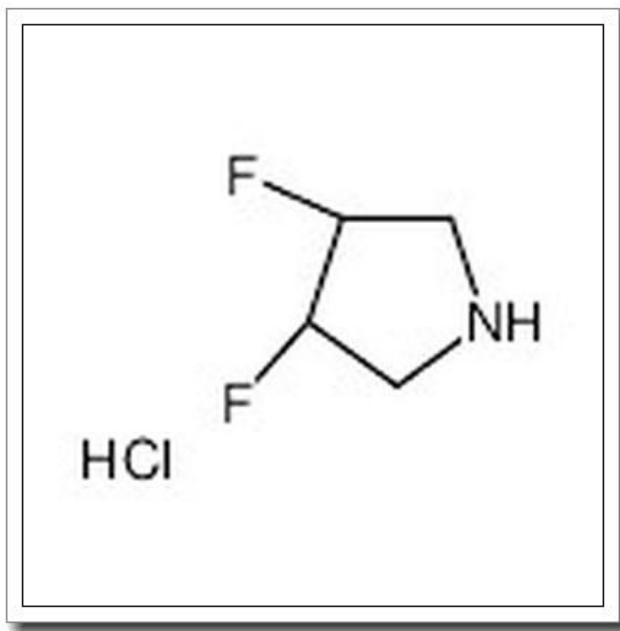


(3S,4R)-rel-3,4-二氟吡咯烷盐酸盐

(3R, 4S)-3, 4-difluoropyrrolidine, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3R, 4S)-3, 4-difluoropyrrolidine, hydrochloride
中文名称	(3S, 4R)-rel-3, 4-二氟吡咯烷盐酸盐
CAS 号	869481-94-7
分子式	C ₄ H ₈ ClF ₂ N
分子量	143. 563
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(3R, 4S)-3, 4-二氟吡咯烷盐酸盐 (CAS 号: 869481-94-7) 是一种高纯度有机氟化合物, 分子式为 $C_4H_8ClF_2N$, 分子量 143.563。该化合物以盐酸盐形式存在, 纯度超过 96%, 具有明确的立体构型 (3R, 4S)。其结构中包含二氟取代的吡咯烷环, 赋予其独特的极性和稳定性, 适合作为手性砌块或中间体用于复杂分子合成。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物, 该分子在药物化学中具有显著价值。氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性、脂溶性和生物膜穿透能力。其刚性吡咯烷骨架常用于构建生物活性分子的核心结构, 例如蛋白酶抑制剂或神经递质类似物。盐酸盐形式提高了水溶性, 便于后续衍生化反应。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发领域:

- 作为关键中间体用于合成抗病毒药物 (如 HCV 蛋白酶抑制剂)
- 构建含氟氨基酸类似物, 用于肽类药物的结构修饰
- 在 PET 显影剂开发中作为氟标记前体
- 手性催化剂的配体组分

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下保存, 储存温度 $2-8^{\circ}C$ 。开封后需充惰性气体保护, 防止吸湿降解。使用前需室温平衡, 避免冷凝。溶解推荐使用无水 DMF 或乙醇, 水溶液需现配现用。操作时应佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 确保立体化学纯度和杂质含量符合标准。该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, CAS 号 869481-94-7 已列入危险化学品目录。泄漏处理需使用惰性吸附材料, 废弃物应作为有害化学废料处置。提供完整 MSDS 及 COA 文件, 运输分类为 UN3286, 包装等级 III。