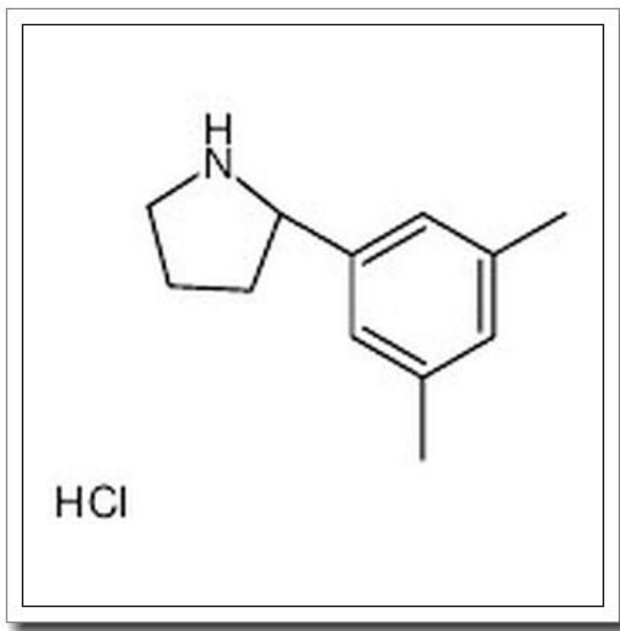


(S)-2-(3,5-二甲基苯基)吡咯烷盐酸盐

(2S)-2-(3,5-dimethylphenyl)pyrrolidine, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-2-(3,5-dimethylphenyl)pyrrolidine, hydrochloride
中文名称	(S)-2-(3,5-二甲基苯基)吡咯烷盐酸盐
CAS 号	1245649-28-8
分子式	C ₁₂ H ₁₈ ClN
分子量	211.731
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S)-2-(3,5-二甲基苯基)吡咯烷盐酸盐 (英文名: (2S)-2-(3,5-dimethylphenyl)pyrrolidine, hydrochloride) 是一种手性有机化合物, CAS 号为 1245649-28-8, 分子式为 $C_{12}H_{18}ClN$, 分子量为 211.731。该化合物以盐酸盐形式存在, 纯度高于 96%, 具有明确的立体构型 (S 构型)。其结构特征为吡咯烷环上连接 3,5-二甲基苯基, 盐酸盐形式提高了其水溶性和稳定性, 适合用于生物化学研究及药物开发领域。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性砌块 (chiral building block), 在不对称合成和药物分子设计中具有重要作用。其吡咯烷结构是许多生物活性分子的核心骨架, 例如神经递质调节剂或酶抑制剂。3,5-二甲基苯基的引入可增强化合物的疏水性, 影响其与靶标蛋白的相互作用, 因此在药物先导化合物优化中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

(2S)-2-(3,5-二甲基苯基)吡咯烷盐酸盐主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为手性配体参与不对称催化反应; 用于构建中枢神经系统药物 (如多巴胺受体调节剂) 的中间体; 在荧光探针或分子标记物合成中作为功能模块。此外, 其衍生物可能用于抗菌或抗肿瘤活性研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 干燥环境中密封存放, 避免反复冻融。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 防止吸湿降解。溶解推荐使用无水乙醇或二甲基亚砜 (DMSO), 配制后溶液建议现配现用。长期储存需定期检测纯度 (HPLC 或 NMR 验证)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、质谱和核磁共振 (NMR) 严格质量控制, 确保化学纯度和立体构型准确。安全信息: 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴

防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，避免直接排放至环境中。

（注：以上说明基于现有化学数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）