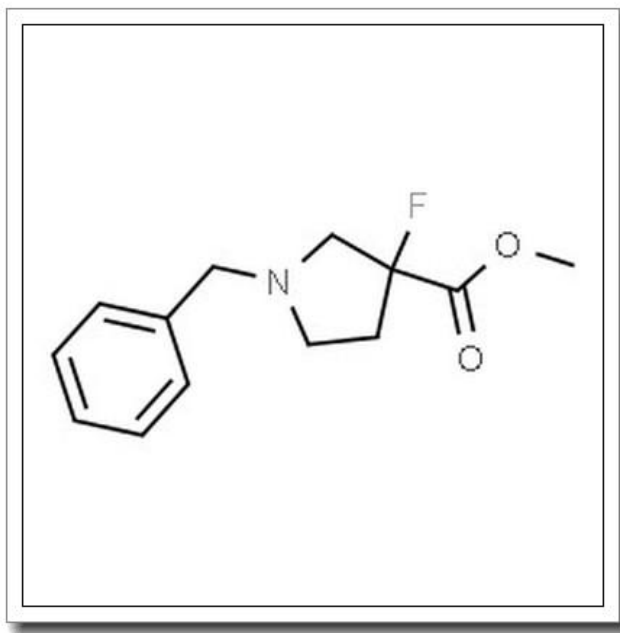


# 1-苄基-3-氟吡咯烷-3-羧酸甲酯

*methyl 1-benzyl-3-fluoropyrrolidine-3-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 1-benzyl-3-fluoropyrrolidine-3-carboxylate
中文名称	1-苄基-3-氟吡咯烷-3-羧酸甲酯
CAS 号	1279669-60-1
分子式	C13H16FN02
分子量	237.27
纯度	>96%

## 产品说明

### 1-苄基-3-氟吡咯烷-3-羧酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

1-苄基-3-氟吡咯烷-3-羧酸甲酯 (CAS 号: 1279669-60-1) 是一种含氟吡咯烷衍生物, 分子式为  $C_{13}H_{16}FN_2O_2$ , 分子量 237.27。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有酯类特征气味, 纯度  $\geq 96\%$ 。其结构中的氟原子和苄基赋予其独特的电子效应与空间位阻, 使其在有机合成中表现出高反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为氟代吡咯烷类化合物, 该产品可通过氟原子的强电负性调节分子极性, 同时吡咯烷环提供刚性骨架, 使其成为药物化学中常见的药效团修饰单元。其在抑制酶活性或调控受体结合方面具有潜在价值, 尤其适用于中枢神经系统药物和抗感染剂的研发。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成, 具体包括:

- (1) 作为蛋白酶抑制剂的关键前体, 用于抗病毒药物开发;
- (2) 构建含氟生物碱类似物, 用于神经药理研究;
- (3) 在不对称催化反应中作为手性助剂或配体组分。实验室级产品适用于小规模有机合成及结构-活性关系 (SAR) 研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性低 ( $< 0.1$  mg/mL)。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明其具有

刺激性（GHS 分类：Skin Irrit. 2），操作时需避免直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并合规废弃。详细毒理学数据可参考随附的 MSDS 文件。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗领域。使用者应具备专业化学知识并遵守当地法规。