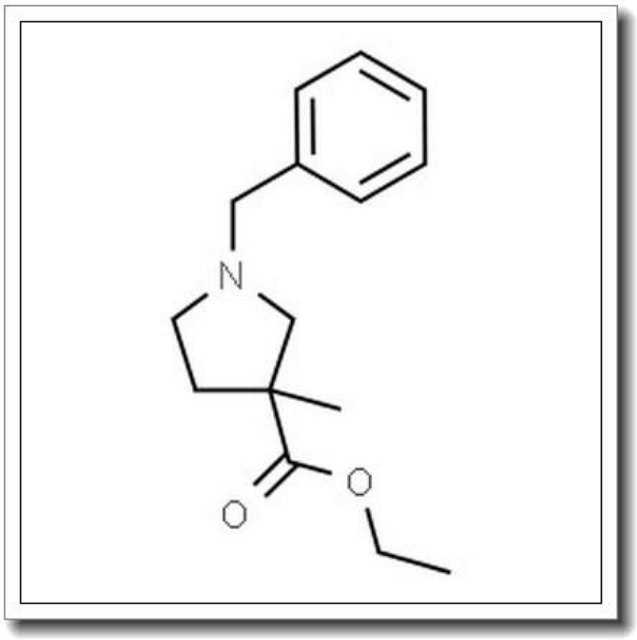
1-苄基-3-甲基吡咯烷-3-羧酸乙酯

ethyl 1-benzyl-3-methylpyrrolidine-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 1-benzyl-3-methylpyrrolidine-3-carboxylate
中文名称	1-苄基-3-甲基吡咯烷-3-羧酸乙酯
CAS 号	1217186-47-4
分子式	C15H21NO2
分子量	247.33
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-苄基-3-甲基吡咯烷-3-羧酸乙酯（ethyl 1-benzyl-3-methylpyrrolidine-3-carboxylate）是一种有机化合物，CAS 号为 1217186-47-4，分子式为 C15H21NO2，分子量为 247.33。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体，纯度通常高于 96%。其结构包含吡咯烷环、苄基和羧酸乙酯基团，具有较好的脂溶性和化学稳定性，适合作为有机合成中间体或生物活性分子修饰的原料。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为杂环化合物的合成砌块，其吡咯烷结构常见于多种药物分子和生物活性物质中。苄基和羧酸乙酯的引入可调节分子的亲脂性和空间位阻，使其在药物设计（如中枢神经系统药物或酶抑制剂开发）中具有潜在应用价值。此外，其结构特征也可能参与氢键或疏水相互作用，影响靶标蛋白的结合活性。

3. 主要应用领域与具体用途

1-苄基-3-甲基吡咯烷-3-羧酸乙酯广泛应用于医药研发和精细化工领域。在药物化学中，它可作为合成抗抑郁、抗帕金森病或镇痛类药物的重要中间体。在有机合成中，常用于构建复杂杂环体系或作为手性合成的起始原料。此外，该化合物也可能用于材料科学中功能分子的修饰或催化剂配体的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉的环境中，避免光照和潮湿，推荐储存温度为 2-8° C。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，以防止氧化或降解。溶解性测试表明，该化合物易溶于有机溶剂（如甲醇、乙醇、二氯甲烷），但在水中溶解度较低。实验操作应在通风橱中进行，并避免与强酸、强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度≥96%，并提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）数据以验证结构。安全信息方面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性，操

作时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置，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需求进一步验证。）