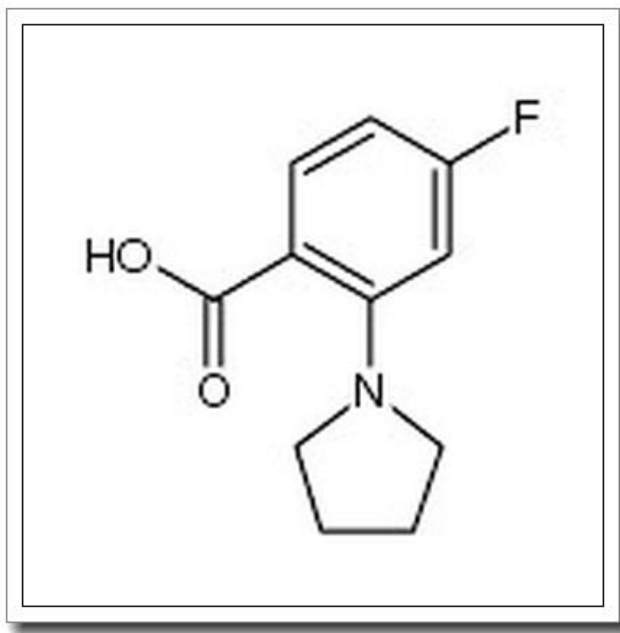


2-(1-吡咯烷基)-4-氟苯甲酸

Benzoic acid, 4- fluoro- 2- (1- pyrrolidinyl)



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | Benzoic acid, 4- fluoro- 2- (1- pyrrolidinyl) |
| 中文名称 | 2-(1-吡咯烷基)-4-氟苯甲酸 |
| CAS 号 | 952680-24-9 |
| 分子式 | C ₁₁ H ₁₂ FN ₂ O ₂ |
| 分子量 | 209.217 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

2-(1-吡咯烷基)-4-氟苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-氟-2-(1-吡咯烷基)苯甲酸 (Benzoic acid, 4-fluoro-2-(1-pyrrolidinyl)), CAS 号为 952680-24-9, 分子式为 C₁₁H₁₂FN₂O₂, 分子量 209.217。其为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 微溶于水。结构中含氟原子和吡咯烷基团, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性, 是药物化学中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯甲酸衍生物, 其氟取代基可增强分子脂溶性和代谢稳定性, 而吡咯烷基团能调节分子构象与靶标结合能力。在生物活性分子设计中, 常用于优化先导化合物的药代动力学性质, 例如提高血脑屏障穿透性或酶抑制活性。其结构特征使其成为激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂等药物研发的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为抗肿瘤、抗抑郁或抗炎药物的合成中间体
- 用于构建含氟杂环化合物库, 进行高通量筛选
- 在放射性标记中作为前体, 用于 PET 示踪剂开发
- 作为配体或催化剂组分参与不对称合成反应

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20° C 干燥环境中, 避免光照与湿气。开启后需充惰性气体保护, 以防降解。使用前需恢复至室温平衡, 称量应在通风橱中进行。溶解时建议先以少量 DMSO 助溶, 再稀释至所需浓度。工作浓度需通过预实验确定, 避免高浓度下产生非特异性结合。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度>96%, 重金属含量<10ppm。操作时需佩戴防护手套、护目镜

及防尘口罩，避免吸入或皮肤直接接触。如意外接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。安全数据表（SDS）可应要求提供。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。使用者应具备有机化学
品操作资质。