

(2S)-2-(2,2-Difluoro-1,3-benzodioxol-4-yl)pyrrolidine hydrochloride (1:1)

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-2-(2,2-Difluoro-1,3-benzodioxol-4-yl)pyrrolidine hydrochloride (1:1)
产品目录号	
CAS 号	1956437-18-5
分子式	C11H12ClF2N02
分子量	263.668
纯度	>96%

产品说明

(2S)-2-(2,2-二氟-1,3-苯并二氧戊环-4-基)吡咯烷盐酸盐 (1:1) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称 (2S)-2-(2,2-二氟-1,3-苯并二氧戊环-4-基)吡咯烷盐酸盐 (1:1)，分子式 $C_{11}H_{12}ClF_2N_2O_2$ ，分子量 263.668，CAS 号 1956437-18-5。其结构包含苯并二氧戊环与吡咯烷骨架，并具有手性中心 (S 构型)，盐酸盐形式提高了水溶性与稳定性。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，适用于高精度生化研究。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过苯并二氧戊环结构参与电子传递，吡咯烷基团可模拟天然生物碱功能，二氟修饰增强其代谢稳定性。其手性特性在受体结合研究中尤为重要，可作为酶抑制剂或信号分子探针，广泛应用于神经科学和药物靶点筛选领域。

3. 主要应用领域与具体用途

(1) 药物研发：作为先导化合物用于中枢神经系统药物（如抗抑郁剂、镇痛剂）的结构优化；

(2) 生化机制研究：用于 5-HT 或 DA 受体相关通路的分子相互作用分析；

(3) 放射性标记前体：可衍生化为 PET 显影剂配体；

(4) 不对称合成：作为手性催化剂或中间体。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 、避光、干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议充氮保存。使用前需平衡至室温，避免反复冻融。溶解推荐使用生理盐水或 DMSO（浓度 $\leq 10\text{mM}$ ），溶液现配现用。操作时需在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包括 HPLC 纯度、水分 (KF 法 $\leq 0.5\%$)、残留溶剂 (GC 符合 ICH Q3C 标准)。安全数据：急性毒性 (LD50 大鼠口服) $> 500\text{mg/kg}$ ，皮肤刺激性类别 3。佩

戴防护手套/眼镜，避免吸入粉尘。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物按危险化学品规范处置。

（本说明基于现有研究数据，实际应用需结合实验条件优化。）