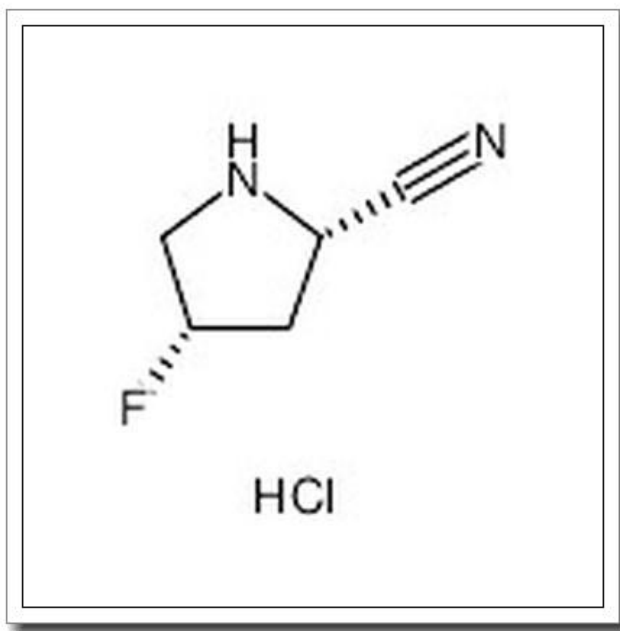


(2S,4S)-4-氟吡咯烷-2-甲腈盐酸盐

2- Pyrrolidinecarbonitr ile, 4- fluoro- , hydrochloride (1:1) ,
(2S, 4S)



产品基本信息

属性	值
化学名称	2- Pyrrolidinecarbonitr ile, 4- fluoro- , hydrochloride (1:1) , (2S, 4S)
中文名称	(2S, 4S)-4-氟吡咯烷-2-甲腈盐酸盐
CAS 号	426844-77-1
分子式	C5H8C1FN2
分子量	150. 582
纯度	>96%

产品说明

2-吡咯烷甲脒盐酸盐产品说明书

产品概述与化学特性

(2S, 4S)-4-氟吡咯烷-2-甲脒盐酸盐 (CAS 426844-77-1) 是一种具有光学活性的含氟杂环化合物, 分子式为 $C_5H_8ClFN_2$, 分子量 150.582。该产品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 属于吡咯烷类衍生物。其结构中的氟原子和脒基赋予分子特殊的电子效应和空间位阻, 盐酸盐形式提高了水溶性和稳定性。

生物化学功能与重要性

作为手性吡咯烷骨架化合物, 该分子在生物体系中表现出显著的立体选择性。氟原子的引入增强了其与生物大分子的相互作用能力, 而脒基可作为活性位点参与多种生物偶联反应。这种结构特征使其成为调控酶活性和受体结合的重要药效团, 在药物设计中具有关键作用。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成含氟生物碱类化合物及蛋白酶抑制剂
2. 不对称催化: 作为手性配体或催化剂前体应用于有机合成
3. 分子探针开发: 氟-19 标记用于 NMR 研究生物分子相互作用
4. 农药化学: 构建新型含氟杀虫剂和杀菌剂的活性核心结构

储存条件与使用建议

本品应避光密封保存于 2-8°C 干燥环境中, 长期储存建议充氮保护。使用前需恢复至室温并保持环境干燥。建议在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤和眼睛。溶解性测试显示易溶于水 (>50mg/mL) 和甲醇, 微溶于乙腈。

质量控制与安全信息

通过 HPLC 测定纯度 >96%, 水分含量 <0.5%, 重金属含量 <10ppm。该化合物属于刺激性化学品, CAS 号 426844-77-1 已列入 REACH 法规注册物质清单。操作时应佩戴防护手套和护目镜, 如发生接触需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地危险化学品处置规范。详细安全数据参见随货 MSDS 文件。