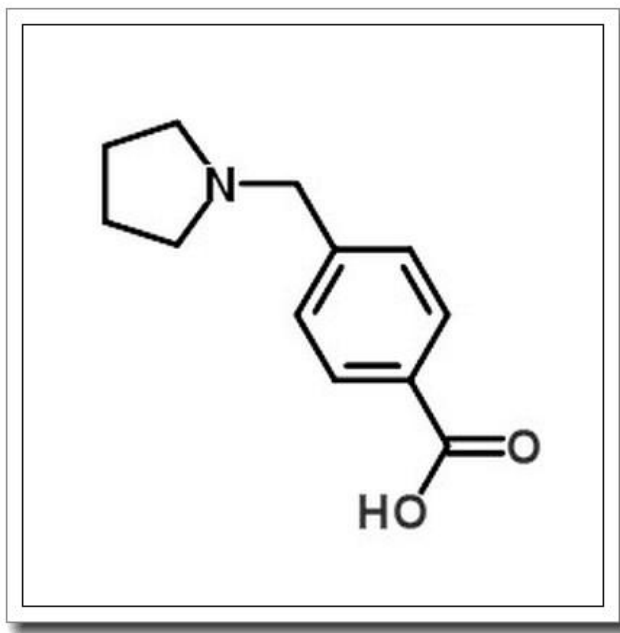


4-(吡咯烷-1-甲基)苯甲酸

4-Pyrrolidin-1-ylmethyl-benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Pyrrolidin-1-ylmethyl-benzoic acid
中文名称	4-(吡咯烷-1-甲基)苯甲酸
CAS 号	159691-25-5
分子式	C ₁₂ H ₁₅ N ₂ O ₂
分子量	205.253
纯度	>96%

产品说明

4-(吡咯烷-1-甲基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(吡咯烷-1-甲基)苯甲酸 (化学名称: 4-Pyrrolidin-1-ylmethyl-benzoic acid) 是一种有机羧酸衍生物, CAS 号为 159691-25-5, 分子式为 $C_{12}H_{15}NO_2$, 分子量为 205.253。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有苯甲酸骨架与吡咯烷基甲基的独特结构, 使其兼具芳香酸和含氮杂环的特性。其溶解性表现为微溶于水, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其分子中的羧基和吡咯烷基团, 在生物化学领域表现出多功能性。羧基可作为氢键供体或受体参与分子识别, 而吡咯烷基团则赋予其碱性及空间位阻效应, 使其成为药物化学中常见的药效团修饰单元。其在酶抑制、受体配体设计及生物共轭反应中具有潜在应用价值, 尤其作为中间体用于合成具有生物活性的杂环化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

4-(吡咯烷-1-甲基)苯甲酸广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的重要中间体。此外, 其可作为荧光标记物的前体, 或用于制备功能化高分子材料 (如离子液体或聚合物单体)。在学术研究中, 该化合物常用于探索构效关系或开发新型催化剂。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐储存温度为 2-8°C, 长期存放建议充氮保护。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解时建议使用惰性有机溶剂, 并避免与强氧化剂或强酸接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 并提供批次相关的质谱 (MS) 和核磁 (NMR) 数据

支持。安全信息显示，其急性毒性较低（LD50 未明确），但可能对眼睛和皮肤产生轻微刺激。如接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物通道处理。

（注：本说明基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小规模预实验验证。）