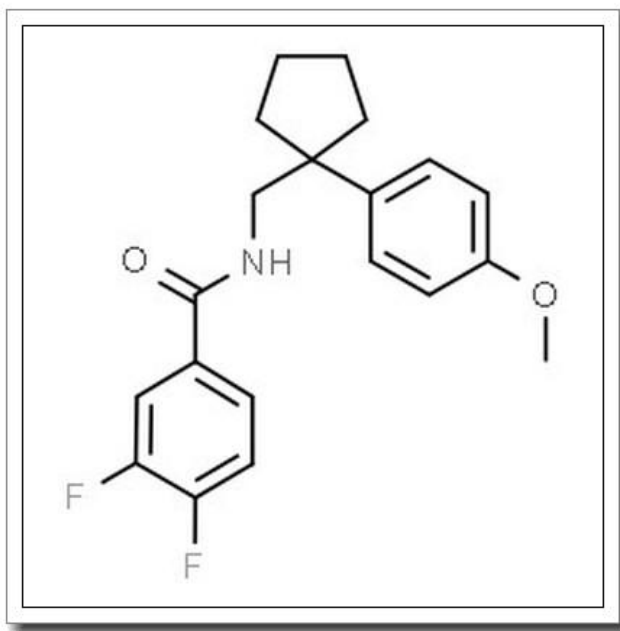


反式-1-苄基-4-(3,4-二氟苯基)吡咯烷-3-羧酸乙酯

Trans-ethyl -1-benzyl-4-(3,4-difluorophenyl)pyrrolidine-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Trans-ethyl -1-benzyl-4-(3,4-difluorophenyl)pyrrolidine-3-carboxylate
中文名称	反式-1-苄基-4-(3,4-二氟苯基)吡咯烷-3-羧酸乙酯
CAS 号	1091474-27-9
分子式	C ₂₀ H ₂₁ F ₂ N ₂ O ₂
分子量	345.38
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

反式-1-苄基-4-(3,4-二氟苯基)吡咯烷-3-羧酸乙酯 (Trans-ethyl -1-benzyl-4-(3,4-difluorophenyl)pyrrolidine-3-carboxylate) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 1091474-27-9, 分子式为 C₂₀H₂₁F₂N₂O₂, 分子量为 345.38。该化合物属于吡咯烷羧酸酯类衍生物, 具有特定的立体构型(反式结构), 其结构中包含苄基、二氟苯基和羧酸乙酯基团, 赋予其独特的化学性质和生物活性。产品纯度超过 96%, 适用于高标准的科研和工业应用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中具有重要作用, 可作为中间体用于合成更复杂的药物分子或生物活性分子。其结构中的二氟苯基和吡咯烷环可能参与氢键相互作用和疏水作用, 从而影响其与靶标蛋白的结合能力。此外, 羧酸乙酯基团提供了进一步化学修饰的位点, 使其在药物设计和开发中具有较高的灵活性。

3. 主要应用领域与具体用途

反式-1-苄基-4-(3,4-二氟苯基)吡咯烷-3-羧酸乙酯主要用于医药研发领域, 特别是在中枢神经系统药物和抗炎药物的合成中作为关键中间体。其具体用途包括但不限于:

- 作为药物先导化合物的结构修饰单元
- 用于研究酶抑制或受体结合的模型分子
- 在有机合成中作为手性砌块, 构建更复杂的杂环体系

4. 储存条件与使用建议

为确保产品的稳定性和活性, 建议在-20° C 下避光干燥储存, 长期保存可置于惰性气体(如氮气)环境中。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。实验操作应在通风良好的环境下进行, 并佩戴适当的防护装备(如手套、护目镜等)。溶解性测试表明, 该化合物易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格质量控制，确保纯度高于 96%。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性，操作时应避免直接接触。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废物处理机构处置。更多详细安全信息请参考产品提供的材料安全数据表（MSDS）。