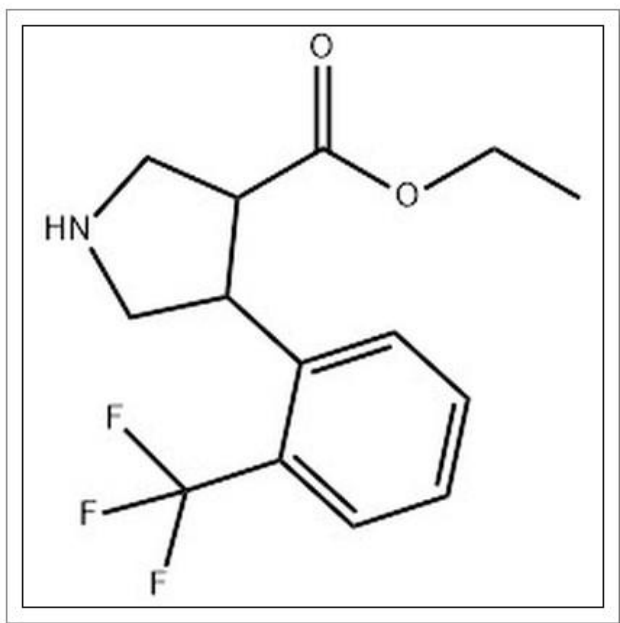


# 反式-4-(2-(三氟甲基)苯基)吡咯烷-3-羧酸乙酯盐酸盐

*Trans-ethyl 4-(2-(trifluoromethyl)phenyl)pyrrolidine-3-carboxylate hydrochloride*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Trans-ethyl 4-(2-(trifluoromethyl)phenyl)pyrrolidine-3-carboxylate hydrochloride
中文名称	反式-4-(2-(三氟甲基)苯基)吡咯烷-3-羧酸乙酯盐酸盐
CAS 号	1778589-16-4
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	287.28
纯度	>96%

## 产品说明

### 反式-4-(2-(三氟甲基)苯基)吡咯烷-3-羧酸乙酯盐酸盐产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 Trans-ethyl 4-(2-(trifluoromethyl)phenyl)pyrrolidine-3-carboxylate hydrochloride, CAS 号为 1778589-16-4, 分子式为 C<sub>14</sub>H<sub>16</sub>F<sub>3</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 287.28。其结构为反式构型的吡咯烷衍生物, 含三氟甲基苯基及羧酸乙酯官能团, 以盐酸盐形式存在, 纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于极性有机溶剂(如甲醇、DMSO), 在酸性条件下稳定性良好。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷类化合物, 其结构中的三氟甲基苯基赋予其独特的电子效应和疏水性, 可能影响靶蛋白的相互作用。羧酸乙酯基团可进一步水解为活性羧酸, 在药物化学中常用于前药设计或酶抑制剂开发。此类结构常见于神经递质调节剂或 G 蛋白偶联受体(GPCR)配体的合成中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为关键中间体用于合成具有生物活性的小分子药物, 尤其是中枢神经系统(CNS)靶向化合物。
- 在药物筛选中用于构建含三氟甲基的杂环化合物库, 以优化药物代谢特性。
- 可能用于研究 5-羟色胺或多巴胺受体调节剂的构效关系。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C、避光、干燥的惰性环境中, 开封后需充氮密封保存。建议使用前恢复至室温并短暂离心以避免吸湿。溶解时优先选用无水 DMSO 配制母液, 后续用缓冲液稀释至工作浓度。操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 核磁共振(NMR)及质谱(MS)验证结构。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。如接触皮肤, 立

即用大量清水冲洗。废弃物应按照危险化学品规范处置。详细安全信息请参阅随附的化学品安全技术说明书（MSDS）。