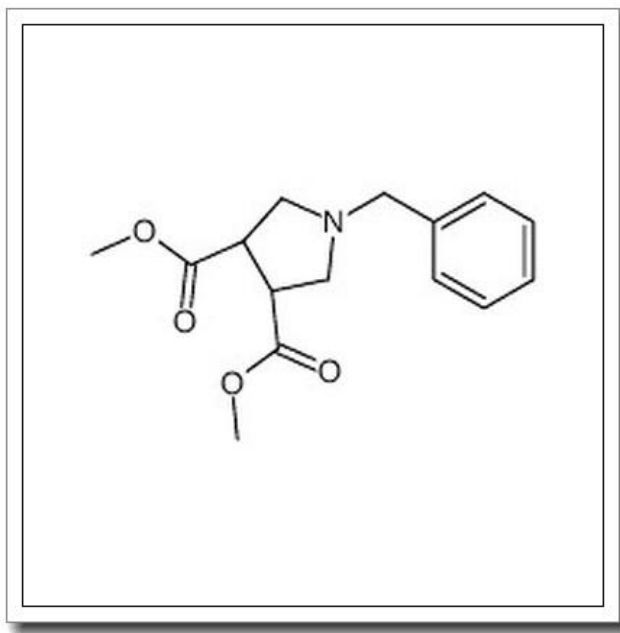


顺式-二甲基 1-苄基吡咯烷-3,4-二羧酸

dimethyl (3R, 4S)-1-benzylpyrrolidine-3, 4-dicarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	dimethyl (3R, 4S)-1-benzylpyrrolidine-3, 4-dicarboxylate
中文名称	顺式-二甲基 1-苄基吡咯烷-3, 4-二羧酸
CAS 号	87813-06-7
分子式	C ₁₅ H ₁₉ N ₀₄
分子量	277. 316
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为顺式-二甲基 1-苄基吡咯烷-3,4-二羧酸酯 (dimethyl (3R,4S)-1-benzylpyrrolidine-3,4-dicarboxylate)，化学式为 C₁₅H₁₉N₀₄，分子量 277.316，CAS 编号 87813-06-7。其结构特征为吡咯烷环上 3,4 位羧酸甲酯化，并带有苄基取代基，呈无色至淡黄色透明液体或低熔点固体。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，具有明确的手性中心 (3R,4S 构型)，需注意其对光、热的敏感性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成生物活性分子的关键中间体，尤其在手性药物开发中具有重要价值。其吡咯烷骨架常见于神经递质调节剂及酶抑制剂中，而苄基与酯基的引入可增强脂溶性，适用于跨膜传递系统的构建。在不对称催化反应中，其刚性结构可作为配体前体，影响立体选择性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 作为阿尔茨海默症治疗药物（如乙酰胆碱酯酶抑制剂）的合成砌块
- 用于构建抗帕金森病化合物的手性核心结构
- 在有机合成中作为不对称 Michael 加成反应的底物

实验室用途包括：

- 手性助剂的制备
- 杂环化合物库的构建

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，避免光照。开封后建议分装使用，剩余物料需充氮密封。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF，操作应在干燥环境下进行。长期储存需定期检测纯度（建议每 6 个月 HPLC 复核）。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包含：

- 核磁共振 (1H/13C NMR) 验证结构
- 质谱 (MS) 确认分子量
- 旋光度测定 ($[\alpha]_{D20}$) 监控光学纯度

安全警示:

- 穿戴防护眼镜及丁腈手套操作
- 皮肤接触后立即用肥皂水冲洗 15 分钟
- 呼吸系统刺激风险 (蒸汽压 0.01mmHg@25°C), 需在通风橱中使用
- 废弃物按危险有机溶剂处理 (UN 编号 1993)

注: 本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版 Material Safety Data Sheet (MSDS)。