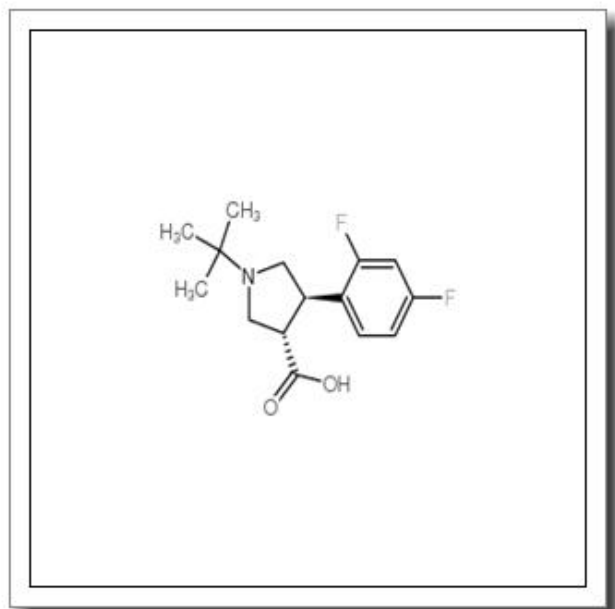


(3S,4R)-1-叔丁基-4-(2,4-二氟苯基)吡咯烷-3-羧酸

(3S, 4R)-1-tert-Butyl-4-(2, 4-difluorophenyl)pyrrolidine-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3S, 4R)-1-tert-Butyl-4-(2, 4-difluorophenyl)pyrrolidine-3-carboxylic acid
中文名称	(3S, 4R)-1-叔丁基-4-(2, 4-二氟苯基)吡咯烷-3-羧酸
CAS 号	455957-94-5
分子式	C ₁₅ H ₁₉ F ₂ N ₂ O ₂
分子量	283.314
纯度	≥96%

产品说明

(3S, 4R)-1-叔丁基-4-(2, 4-二氟苯基)吡咯烷-3-羧酸产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(3S, 4R)-1-tert-Butyl-4-(2, 4-difluorophenyl)pyrrolidine-3-carboxylic acid, CAS 号为 455957-94-5, 分子式为 C₁₅H₁₉F₂N₂O₂, 分子量为 283.314。该化合物为手性吡咯烷衍生物, 具有特定的(3S, 4R)立体构型, 结构中含叔丁基保护基团、2, 4-二氟苯基取代基及羧酸官能团。其纯度≥96%, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状, 需通过 HPLC 或 NMR 验证其光学纯度与化学纯度。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块, 该化合物在药物化学中具有重要价值。其刚性吡咯烷骨架和氟取代苯环可增强与生物靶点的结合能力, 常用于设计蛋白酶抑制剂或 GPCR 调节剂。羧酸基团便于进一步衍生化, 而叔丁基保护基可提高中间体的稳定性, 适用于多步合成反应。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于创新药物研发领域, 尤其是抗感染和中枢神经系统药物候选分子的合成。具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成 HIV 蛋白酶抑制剂或抗菌化合物
- 用于构建含氟手性药物分子, 优化其代谢稳定性和膜穿透性
- 在不对称催化反应中作为配体或底物

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时恢复至室温并保持环境干燥, 避免反复冻融。溶解性测试表明可溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂, 水溶性较差, 建议先配制高浓度储备液后稀释使用。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度分析、旋光度测定及重金属残留检测。安全数据表明该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护眼镜和手套, 在通风橱中处

理。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，符合当地环保法规。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。具体应用前请查阅最新文献并验证其适用性。