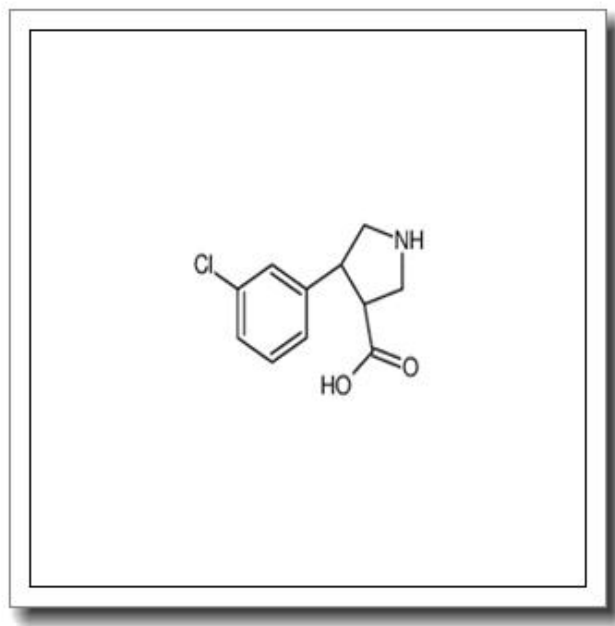


(3S,4R)-4-(3-氯苯基)吡咯烷-3-羧酸

(3S, 4R)-4-(3-chlorophenyl)pyrrolidine-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3S, 4R)-4-(3-chlorophenyl)pyrrolidine-3-carboxylic acid
中文名称	(3S, 4R)-4-(3-氯苯基)吡咯烷-3-羧酸
CAS 号	1047651-80-8
分子式	C ₁₁ H ₁₂ ClN ₂ O ₂
分子量	225.671
纯度	≥96%

产品说明

(3S, 4R) -4- (3-氯苯基) 吡咯烷-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 (3S, 4R) -4- (3-氯苯基) 吡咯烷-3-羧酸，CAS 号 1047651-80-8，分子式 $C_{11}H_{12}ClNO_2$ ，分子量 225.671。其结构中含有一个手性中心 (3S, 4R 构型) 和极性羧酸基团，赋予其良好的水溶性和反应活性。纯度 $\geq 96\%$ (HPLC)，杂质含量严格控制在制药级标准内。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吡咯烷羧酸类衍生物，其立体特异性结构使其能够作为手性合成子或酶抑制剂的核心骨架。3-氯苯基的引入增强了疏水性，可优化药物分子的膜穿透性，而羧酸基团则便于进一步衍生化为酰胺或酯类活性分子。在药物研发中，此类结构常作为 β -脯氨酸类似物，用于调节神经递质受体或炎症相关靶点。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键医药中间体，主要用于以下领域：

- 中枢神经系统药物：用于合成多巴胺 D3 受体选择性配体，潜在治疗帕金森病或药物成瘾
 - 抗抑郁药物开发：作为 5-羟色胺再摄取抑制剂的构效优化模块
 - 不对称合成：作为手性助剂或催化剂配体，构建复杂杂环化合物
- 实验室研究中可用于荧光探针标记或蛋白质结合实验的羧基修饰位点。

4. 储存条件与使用建议

推荐避光密封保存于 -20°C 干燥环境中，长期储存需充氮保护。开封后建议分装使用，避免反复冻融。溶解时优先选用 DMSO 或碱性缓冲液 ($\text{pH}>7$)，若出现絮状物可通过轻微加热至 60°C 促溶。实验操作需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

批次检测包含 HPLC 纯度分析、旋光度测定 ($[\alpha]_{\text{D}20}$) 及重金属残留检测

($<10\text{ppm}$)。根据 SDS 文件，该产品属于刺激性化学品 (GHS 分类: Eye Irrit.

2) , 需佩戴护目镜和丁腈手套操作。意外吸入时应立即转移至空气新鲜处, 皮肤接触后用大量清水冲洗至少 15 分钟。废弃物处理需符合当地有机卤化物处置法规。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于诊断或治疗用途。具体应用方案建议参考文献或咨询专业技术支持。