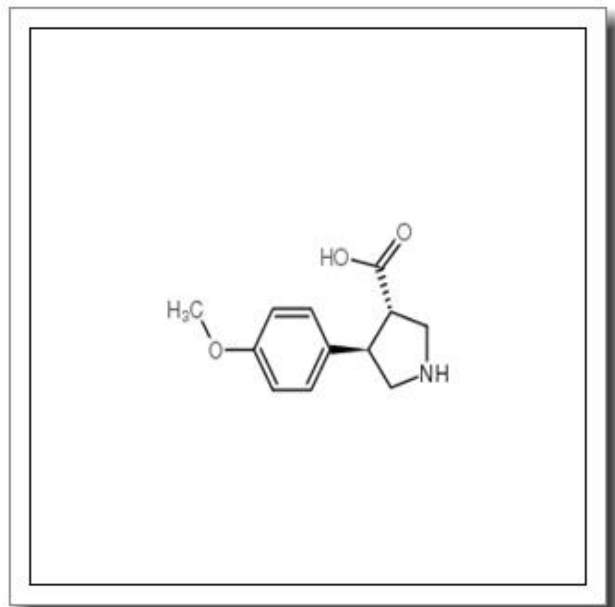


# (3S,4R)-4-(4-甲氧基苯基)吡咯烷-3-羧酸盐酸盐

*trans-4-(4-Methoxyphenyl)pyrrolidine-3-carboxylic acid hydrochloride*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	trans-4-(4-Methoxyphenyl)pyrrolidine-3-carboxylic acid hydrochloride
中文名称	(3S, 4R)-4-(4-甲氧基苯基)吡咯烷-3-羧酸盐酸盐
CAS 号	1049978-93-9
分子式	C12H15NO3
分子量	221. 252
纯度	≥96%

## 产品说明

### (3S, 4R)-4-(4-甲氧基苯基)吡咯烷-3-羧酸盐产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名为 trans-4-(4-Methoxyphenyl)pyrrolidine-3-carboxylic acid hydrochloride, CAS 号 1049978-93-9, 分子式 C<sub>12</sub>H<sub>15</sub>N<sub>03</sub>, 分子量 221.252。其结构包含吡咯烷环与对甲氧基苯基的立体特异性组合 (3S, 4R 构型)，羧酸基团与盐酸盐形式增强了水溶性。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，熔点为 210-215°C (分解)，需避光保存。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为手性吡咯烷衍生物，该化合物是合成生物活性分子的关键中间体，尤其适用于构建药物分子中的刚性骨架。其甲氧基苯基可参与疏水相互作用，而羧酸基团便于进一步衍生化。在神经递质调节剂和酶抑制剂设计中具有潜在应用价值，可能影响多巴胺或 5-羟色胺受体信号通路。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发：用于制备中枢神经系统 (CNS) 靶向药物候选化合物
- 不对称合成：作为手性助剂或构建块参与立体选择性反应
- 化学生物学：用于探针分子开发，研究蛋白质-小分子相互作用
- 临床前研究：潜在应用于抗抑郁或镇痛类药物的结构优化

#### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20°C、干燥惰性气体环境下，短期使用可存放于 2-8°C 干燥器。开封后建议充氮密封，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，溶解推荐使用 DMF 或 DMSO (浓度 ≤10mM)，水溶液需现配现用。

#### 5. 质量控制与安全信息

批次质检包含 HPLC 纯度分析、水分测定 (KF 法) 和残溶检测 (GC)。安全数据：LD<sub>50</sub> 未建立，操作时需佩戴护目镜与防尘口罩 (NIOSH 标准 N95)。皮肤接触后立

即用肥皂水冲洗，眼部接触需用生理盐水冲洗 15 分钟。废弃物按危险化学品处理，避免直接排放。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。使用前请查阅最新版 MSDS 并进行风险评估。