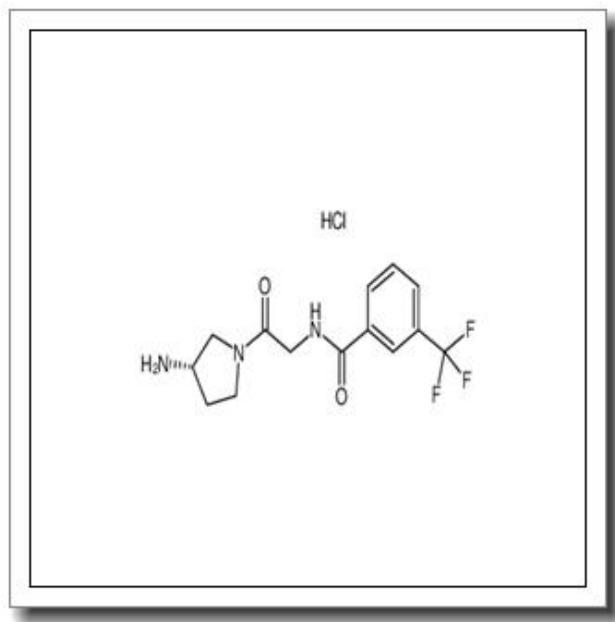


(S)-N-{2-[3-aminopyrrolidin-1-yl]-2-oxoethyl}-3-(trifluoromethyl)benzamide hydrochloride

(S)-N-{2-[3-aminopyrrolidin-1-yl]-2-oxoethyl}-3-(trifluoromethyl)benzamide hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-N-{2-[3-aminopyrrolidin-1-yl]-2-oxoethyl}-3-(trifluoromethyl)benzamide hydrochloride
中文名称	(S)-N-{2-[3-aminopyrrolidin-1-yl]-2-oxoethyl}-3-(trifluoromethyl)benzamide hydrochloride
CAS 号	857651-01-5
分子式	C ₁₄ H ₁₇ C ₁ F ₃ N ₃ O ₂
分子量	351.752

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

(S)-N-{2-[3-氨基吡咯烷-1-基]-2-氧代乙基}-3-(三氟甲基)苯甲酰胺盐酸盐产品说明书

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 (S)-N-{2-[3-氨基吡咯烷-1-基]-2-氧代乙基}-3-(三氟甲基)苯甲酰胺盐酸盐，CAS 号 857651-01-5，分子式 $C_{14}H_{17}ClF_3N_3O_2$ ，分子量 351.752。其结构中包含手性吡咯烷基团、三氟甲基苯甲酰胺片段及盐酸盐形式，赋予其特定溶解性（易溶于水、甲醇等极性溶剂）和稳定性。纯度 $\geq 96\%$ （HPLC 检测），符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性氨基吡咯烷衍生物，其分子中的氨基和酰胺键可参与氢键形成及分子识别，三氟甲基增强脂溶性和代谢稳定性。在药物化学中，此类结构常作为酶抑制剂或受体调节剂的药效团，尤其适用于中枢神经系统（CNS）靶点研究。其盐酸盐形式提高了生物利用度和储存稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- （1）作为先导化合物用于神经退行性疾病（如阿尔茨海默症）或精神类疾病（如抑郁症）的药物开发；
- （2）用于蛋白酶或激酶抑制剂的活性筛选；
- （3）作为手性合成中间体，参与不对称催化反应。实验室研究中需根据具体实验体系优化浓度（推荐初始测试浓度 1-10 μM ）。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 、避光、干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议充氮密封保存，避免反复冻融。使用时需佩戴防护手套及护目镜，在通风橱中操作。溶解建议使用无菌 PBS 或 DMF，现配现用，避免长期储存水溶液。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、NMR 及质谱验证结构，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：急性毒性（LD50 大鼠口服） $> 500 \text{ mg/kg}$ ，属于刺激性物质（皮肤接触可能引起红肿）。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用需结合具体实验方案验证。）