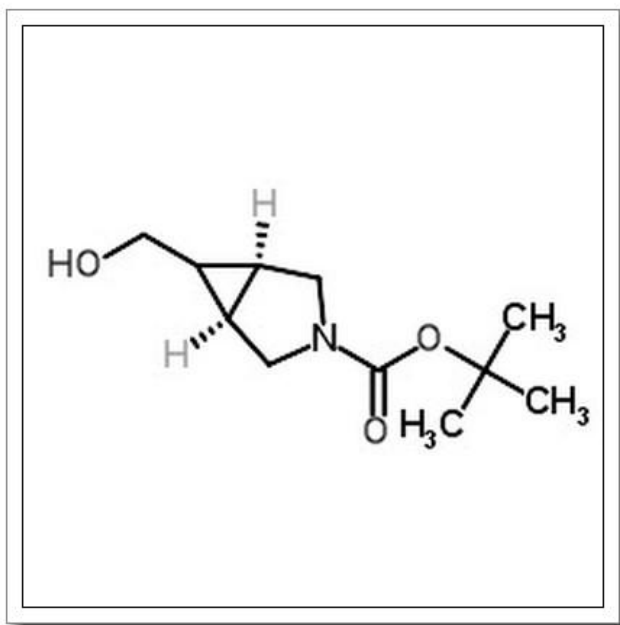


(1R,5S,6R)-6-(羟基甲基)-3-氮杂双环 [3.1.0]己烷-3-羧酸叔丁酯

tert-Butyl (1R, 5S, 6R)-6-(hydroxymethyl)-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl (1R, 5S, 6R)-6-(hydroxymethyl)-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-3-carboxylate</i>
中文名称	(1R, 5S, 6R)-6-(羟基甲基)-3-氮杂双环[3.1.0]己烷-3-羧酸叔丁酯
CAS 号	419572-18-2
分子式	C ₁₁ H ₁₉ N ₃ O ₃
分子量	213.273
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(1R, 5S, 6R)-6-(羟基甲基)-3-氮杂双环[3.1.0]己烷-3-羧酸叔丁酯 (CAS号: 419572-18-2), 化学式为 C₁₁H₁₉N₃O₃, 分子量 213.273。该化合物是一种高纯度 (>96%) 的氮杂双环衍生物, 具有独特的刚性双环结构和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团。其立体构型 (1R, 5S, 6R) 和羟基甲基官能团使其在有机合成中表现出显著的手性诱导能力。

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广泛用于构建生物活性分子的核心骨架。Boc 保护基可选择性脱除, 便于后续官能团修饰。其双环结构能增强目标分子的构象稳定性, 特别适用于蛋白酶抑制剂、神经递质类似物等药物的研发。羟基甲基的引入进一步拓展了衍生化潜力, 例如通过酯化或氧化反应生成关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

1. 抗病毒药物研发: 作为 HIV 蛋白酶抑制剂的合成前体
2. 中枢神经系统药物: 用于构建 GABA 受体调节剂的刚性骨架
3. 不对称合成: 作为手性助剂参与碳-碳键形成反应
4. PROTAC 技术: 作为连接子 (linker) 的组成部分

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温以避免吸湿。溶解性测试表明, 本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。实验操作建议在干燥环境下进行, 若需脱除 Boc 保护基, 可使用三氟乙酸/二氯甲烷 (1:1) 体系。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 >96%, 水分含量 <0.5%。产品需避免与强氧化剂接触, 操作时佩

戴防护手套及护目镜。MSDS 数据显示其急性毒性较低 ($LD_{50} > 2000 \text{ mg/kg}$)，但可能对眼睛和呼吸道产生轻微刺激。废弃物处理需符合有机溶剂管理规定。

注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。