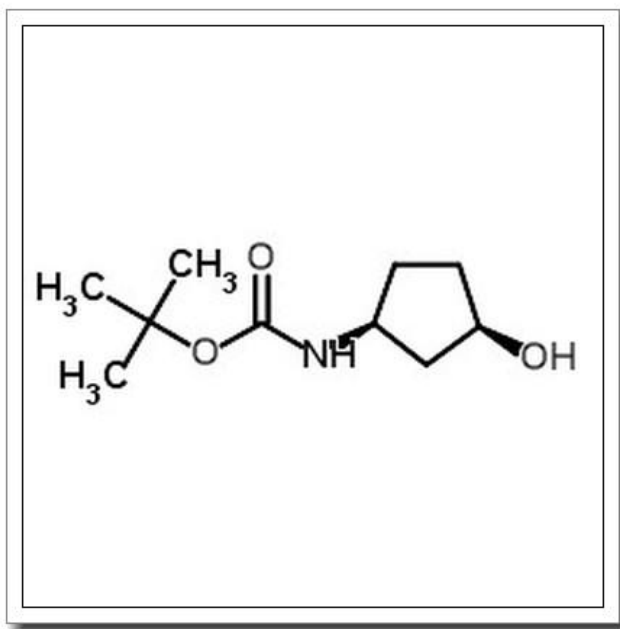


[(1R,3S)-3-羟基环戊基]氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl N-[(1R, 3S)-3-hydroxycyclopentyl]carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl N-[(1R, 3S)-3-hydroxycyclopentyl]carbamate</i>
中文名称	[(1R, 3S)-3-羟基环戊基]氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	225641-84-9
分子式	C ₁₀ H ₁₉ N ₃ O
分子量	201.263
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为[(1R, 3S)-3-羟基环戊基]氨基甲酸叔丁酯 (tert-butyl N-[(1R, 3S)-3-hydroxycyclopentyl]carbamate), CAS 号 225641-84-9, 分子式 C₁₀H₁₉N₀₃, 分子量 201.263。该化合物是一种手性环戊基衍生物, 纯度高于 96%, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和羟基官能团使其在有机合成中具有显著的反应活性, 同时表现出良好的溶解性于常见有机溶剂 (如甲醇、二氯甲烷)。

2. 生物化学功能与重要性

作为重要的手性中间体, 该化合物在药物化学和生物化学领域具有广泛用途。其 Boc 保护基可选择性脱除, 便于后续氨基的衍生化反应; 而羟基位点则为结构修饰提供了关键反应位点。在蛋白酶抑制剂、抗病毒药物及神经活性分子的合成中, 该结构单元常被用于构建核心药效团, 尤其在立体选择性合成中能有效控制产物的光学纯度。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- 1) 医药研发: 作为合成 HIV 蛋白酶抑制剂 (如沙奎那韦类似物) 的关键中间体;
- 2) 不对称催化: 参与手性配体的制备, 用于过渡金属催化反应;
- 3) 多肽化学: 通过 Boc 保护策略实现氨基的定向偶联;
- 4) 材料科学: 用于功能化聚合物的单体合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。使用前需恢复至室温并保持干燥环境, 避免与强酸、强氧化剂接触。溶解性测试表明, 推荐使用无水乙醇或四氢呋喃作为溶剂体系。实验操作应在通风橱中进行, 并佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 为 >2000 mg/kg (大鼠口服)，但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。废弃物处置需遵守当地化学品管理法规，建议采用焚烧法处理。详细毒理学数据请参阅产品附带的 MSDS 文件。