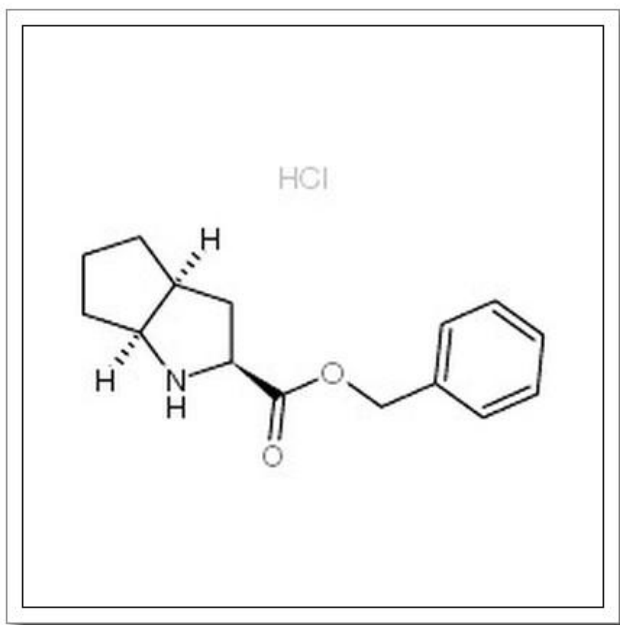


(1S,3S,5S)-2-氮杂双环[3,3,0]辛烷-3-羧酸苄酯盐酸盐

benzyl (2S, 3aS, 6aS)-1, 2, 3, 3a, 4, 5, 6, 6a-octahydrocyclopenta[b]pyrrole-2-carboxylate, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	benzyl (2S, 3aS, 6aS)-1, 2, 3, 3a, 4, 5, 6, 6a-octahydrocyclopenta[b]pyrrole-2-carboxylate, hydrochloride
中文名称	(1S, 3S, 5S)-2-氮杂双环[3, 3, 0]辛烷-3-羧酸苄酯盐酸盐
CAS 号	87269-87-2
分子式	C ₁₅ H ₂₀ C ₁ N ₂ O ₂
分子量	281. 778
纯度	>96%

产品说明

产品名称: (1S, 3S, 5S)-2-氮杂双环[3, 3, 0]辛烷-3-羧酸苄酯盐酸盐

化学名称: benzyl (2S, 3aS, 6aS)-1, 2, 3, 3a, 4, 5, 6, 6a-

octahydrocyclopenta[b]pyrrole-2-carboxylate, hydrochloride

CAS 号: 87269-87-2

分子式: C₁₅H₂₀C₁N₀₂

分子量: 281.778

纯度: >96%

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，是一种具有特定立体构型的氮杂双环化合物。其分子结构包含稠合的环戊烷和吡咯烷环系，以及羧酸苄酯基团，盐酸盐形式提高了其水溶性和稳定性。分子量为 281.778，纯度经 HPLC 检测确认高于 96%，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体，在药物化学和生物化学研究中具有重要价值。其刚性双环结构可作为药效团，用于设计蛋白酶抑制剂或受体配体。羧酸苄酯基团可通过催化氢化脱保护，进一步衍生为活性羧酸衍生物，在肽类化合物合成中发挥关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于构建具有生物活性的氮杂双环类化合物，尤其适用于中枢神经系统药物候选分子的合成。
- 不对称合成: 作为手性模板参与立体选择性反应，构建复杂天然产物骨架。
- 生化探针: 修饰后可开发为酶活性位点研究的工具分子。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于 2-8°C 干燥避光环境，开封后需充惰性气体保护。

- 使用前需恢复至室温并短暂离心，避免吸湿。
- 建议在通风橱中操作，溶于二甲基亚砷(DMSO)时浓度不宜超过 50mM。

5. 质量控制与安全信息

- 质检标准：HPLC 纯度>96%，水分含量<0.5%，残溶符合 ICH 指南。
- 安全警示：具刺激性，避免接触皮肤和眼睛，操作时需佩戴防护手套及护目镜。
- 废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需根据实验设计进一步优化条件。