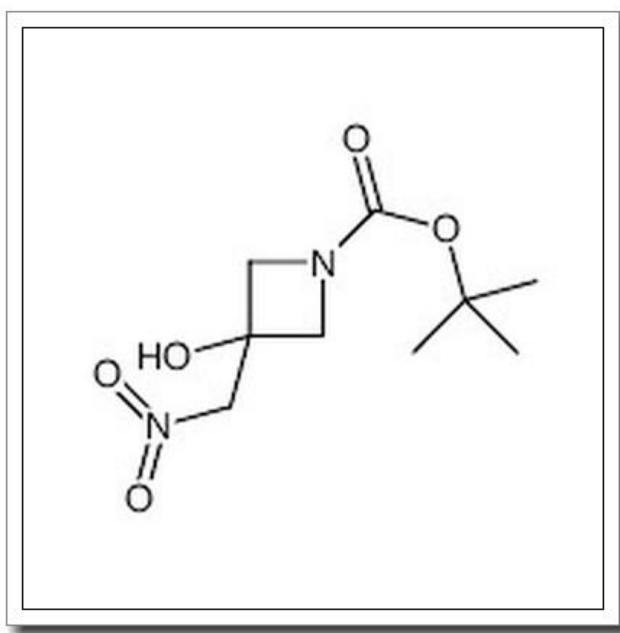


# 3-羟基-3-(硝基甲基)氮杂丁烷-1-羧酸叔丁酯

*tert-butyl 3-hydroxy-3-(nitromethyl)azetidine-1-carboxylate*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | tert-butyl 3-hydroxy-3-(nitromethyl)azetidine-1-carboxylate |
| 中文名称  | 3-羟基-3-(硝基甲基)氮杂丁烷-1-羧酸叔丁酯                                   |
| CAS 号 | 1008526-70-2  |
| 分子式   | C9H16N2O5   |
| 分子量   | 232.234   |
| 纯度    | >96%  |

## 产品说明

### 3-羟基-3-(硝基甲基)氮杂丁烷-1-羧酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl 3-hydroxy-3-(nitromethyl)azetidine-1-carboxylate，分子式 C<sub>9</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>，分子量 232.234，CAS 号 1008526-70-2。其结构中同时包含羟基、硝基甲基及氮杂环丁烷骨架，具有较高的反应活性。叔丁氧羰基（Boc）保护基的存在增强了化合物的稳定性，使其适用于多步合成反应。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合有机合成中间体的标准要求。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是修饰氮杂环丁烷类结构的关键中间体，其硝基甲基可通过还原反应转化为氨基，进一步用于构建 β-氨基醇或手性催化剂。羟基与 Boc 基团的协同作用使其成为药物化学中构建四元杂环体系的重要模块，尤其在抗菌剂和神经调节剂研发中具有潜在价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成领域，具体用途包括：

- 作为 β-内酰胺类抗生素侧链修饰的前体
- 用于合成含氮杂环的激酶抑制剂候选分子
- 在不对称催化反应中作为手性配体的合成原料
- 参与多肽模拟物的结构改造

#### 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并保持干燥环境。溶解性测试表明其在 DMSO、甲醇中溶解度良好（>50 mg/mL），水溶液中易分解，建议现配现用。实验操作应在通风橱中进行。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）双重验证结构，批次间一致性误差 <2%。安

全数据表明其对眼睛和呼吸道有轻微刺激性（GHS 分类: Eye Irrit. 2），操作时需佩戴护目镜及防尘口罩。废弃物应作为有害化学品处置，避免与强氧化剂接触。

注：具体实验方案建议参考文献报道的氮杂环丁烷衍生物合成方法，并根据目标产物结构优化反应条件。