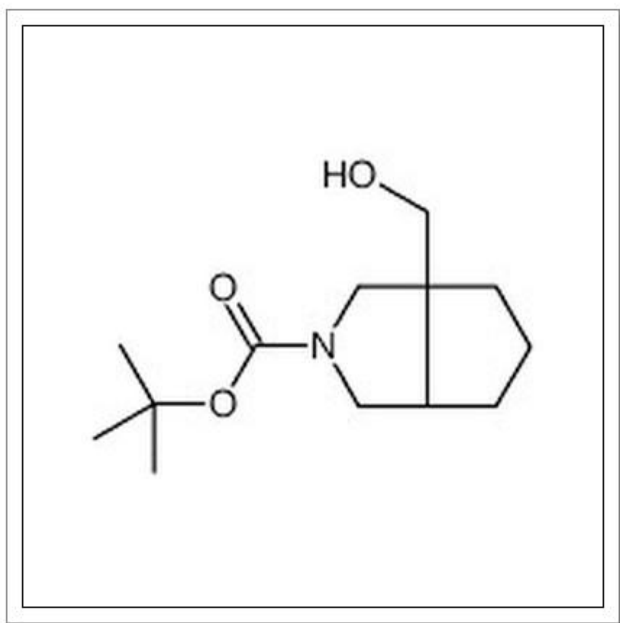


3a-(羟基甲基)六氢环戊并[c]吡咯-2(1h)-羧酸叔丁酯

tert-butyl 3a-(hydroxymethyl)-1, 3, 4, 5, 6, 6a-hexahydrocyclopenta[c]pyrrole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3a-(hydroxymethyl)-1, 3, 4, 5, 6, 6a-hexahydrocyclopenta[c]pyrrole-2-carboxylate</i>
中文名称	3a-(羟基甲基)六氢环戊并[c]吡咯-2(1h)-羧酸叔丁酯
CAS 号	1223748-37-5
分子式	C ₁₃ H ₂₃ N ₃ O ₃
分子量	241. 327
纯度	>96%

产品说明

3a-(羟基甲基)六氢环戊并[c]吡咯-2(1h)-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl 3a-(hydroxymethyl)-1,3,4,5,6,6a-hexahydrocyclopenta[c]pyrrole-2-carboxylate, CAS 号为 1223748-37-5, 分子式为 C₁₃H₂₃N₃O₃, 分子量为 241.327。该化合物是一种高纯度 (>96%) 的杂环有机中间体, 结构中含有六氢环戊并[c]吡咯骨架和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 兼具亲水性的羟甲基修饰。其固态通常表现为白色至类白色结晶粉末, 可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯烷类衍生物, 该分子在药物化学中具有重要价值。其刚性环戊并吡咯结构可作为药效团的核心骨架, 而 Boc 保护基团能选择性脱除, 便于后续官能团修饰。羟甲基的引入增强了分子极性, 使其在靶标结合中可能参与氢键相互作用。这类结构单元常见于神经活性化合物、蛋白酶抑制剂及天然产物全合成中。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- (1) 医药研发: 作为关键中间体用于构建中枢神经系统药物 (如多巴胺受体调节剂) 或抗病毒药物;
- (2) 不对称合成: 手性骨架可用于催化不对称反应的手性诱导剂开发;
- (3) 材料科学: 作为功能化单体参与高分子材料的改性。典型用途包括 Boc 保护胺的脱保护反应、羟甲基的酯化或氧化衍生化等。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氩气) 保护下密封保存, 长期储存温度应控制在 -20° C。开封后需避免反复冻融, 建议分装使用。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套及护目镜。溶解性测试推荐优先使用无水 DMF 或 THF, 反应体系中需注意避免强酸强碱条件导致的 Boc 基团意外裂解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，批次间差异控制在±1%以内。MS 和 NMR 谱图数据可随 COA 提供。安全数据方面，属于刺激性化学品（GHS 分类：Eye Irrit. 2），避免与皮肤直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理。废弃物处置应遵循当地危险化学品管理条例。详细毒理学数据参见随货 MSDS 文档。

注：本说明基于当前研究数据编制，实际应用前请进行小试验证。产品规格可能因工艺优化调整，恕不另行通知。