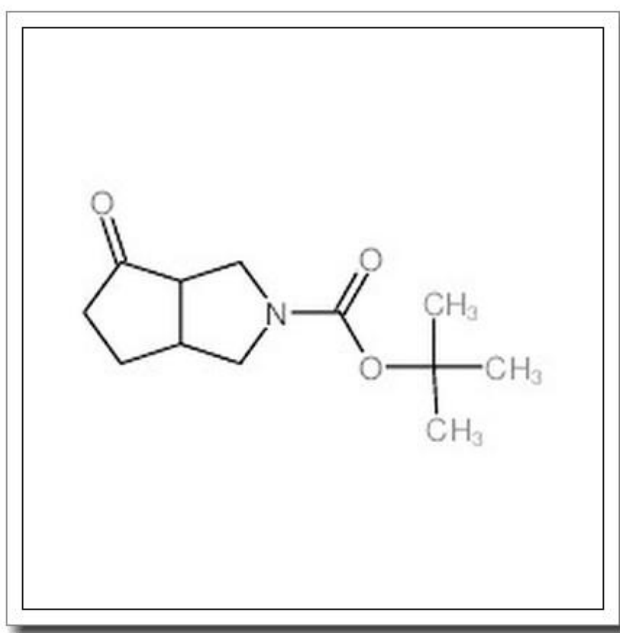


# 4-叔丁基-4-氧代环戊[C]吡咯-2-(1 氢)- 羧酸

*tert-Butyl 4-oxohexahydrocyclopenta[c]pyrrole-2(1H)-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 4-oxohexahydrocyclopenta[c]pyrrole-2(1H)-carboxylate
中文名称	4-叔丁基-4-氧代环戊[C]吡咯-2-(1 氢)-羧酸
CAS 号	879686-42-7
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	225.284
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-叔丁基-4-氧代环戊[C]吡咯-2-(1 氢)-羧酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-Butyl 4-oxohexahydrocyclopenta[c]pyrrole-2(1H)-carboxylate, CAS 号为 879686-42-7, 分子式为 C<sub>12</sub>H<sub>19</sub>N<sub>03</sub>, 分子量为 225.284。该化合物是一种高纯度 (>96%) 的杂环羧酸衍生物, 结构中含有环戊并吡咯骨架和叔丁氧羰基保护基团, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状。其独特的环状结构使其在有机合成中表现出良好的反应活性, 尤其在构建复杂杂环体系时具有重要价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为关键中间体, 在药物化学和生物活性分子合成中具有广泛应用。其结构中的环戊并吡咯单元是多种生物碱类药物的核心骨架, 而叔丁氧羰基 (Boc) 保护基的存在增强了化合物的稳定性, 便于后续脱保护反应。在蛋白酶抑制剂、抗炎药物及神经活性分子的研发中, 该分子常被用于构效关系研究。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域: 医药研发中作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的合成前体; 材料科学中用于制备功能性高分子单体; 学术研究中作为手性合成砌块。具体用途包括但不限于: 通过酰胺化反应构建肽类衍生物、参与钯催化交叉偶联反应、作为不对称氢化反应的底物等。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 惰性气体 (如氩气) 环境下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温以避免结露, 称量应在干燥环境中进行。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于醇类, 不推荐直接用于水相反应体系。实验操作建议在通风橱中进行。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 批次间一致性误差控制在 ±1% 以内。安全数据表

明, 该物质可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴防护眼镜及丁腈手套。如发生接触, 需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例, 建议通过专业机构进行焚化处置。

(全文共计 498 字)