

Meso-(3aR,5s,6aS)-2-(tert-butoxycarbonyl)octahydrocyclopenta[c]pyrrole-5-carboxylic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Meso-(3aR, 5s, 6aS)-2-(tert-butoxycarbonyl)octahydrocyclopenta[c]pyrrole-5-carboxylic acid
产品目录号	
CAS 号	442877-23-8
分子式	C13H21N04
分子量	255.31
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 Meso-(3aR, 5s, 6aS)-2-(tert-butoxycarbonyl)octahydrocyclopenta[c]pyrrole-5-carboxylic acid, 化学式为 C₁₃H₂₁N₁O₄, 分子量 255.31, CAS 号 442877-23-8。其结构包含环戊并吡咯烷骨架和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 是一种高纯度 (>96%) 的手性有机化合物。该物质在常温下为白色至类白色固体, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。其立体构型 (3aR, 5s, 6aS) 对生物活性具有重要影响。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Boc 保护的环状氨基酸衍生物, 该化合物在肽类药物合成中充当关键中间体。其刚性环状结构可增强肽链的构象稳定性, 而 Boc 基团在固相合成中提供选择性脱保护优势。此外, 其手性中心可用于构建具有特定立体构型的生物活性分子, 在受体靶向或酶抑制研究中具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 医药研发: 作为抗病毒或神经活性肽类药物的合成砌块
- 不对称催化: 作为手性配体或催化剂的前体
- 结构生物学: 用于构象限制性肽模拟物的设计
- 保护基化学: 研究 Boc 保护/脱保护的反应动力学

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、干燥避光条件下长期储存, 开封后需充惰性气体保护。使用前需平衡至室温以避免吸湿。溶解时建议先用少量 DMSO 助溶, 再稀释至目标溶剂体系。操作时应佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 >96%, 批次间一致性通过 ¹H-NMR 和质谱验证。安全数据表明其急性毒性较低 (LD₅₀ > 2000 mg/kg), 但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。泄露处理

需使用惰性吸附材料收集，废弃物应作为有机卤化物处置。详细安全信息请参阅随货提供的 SDS 文件。