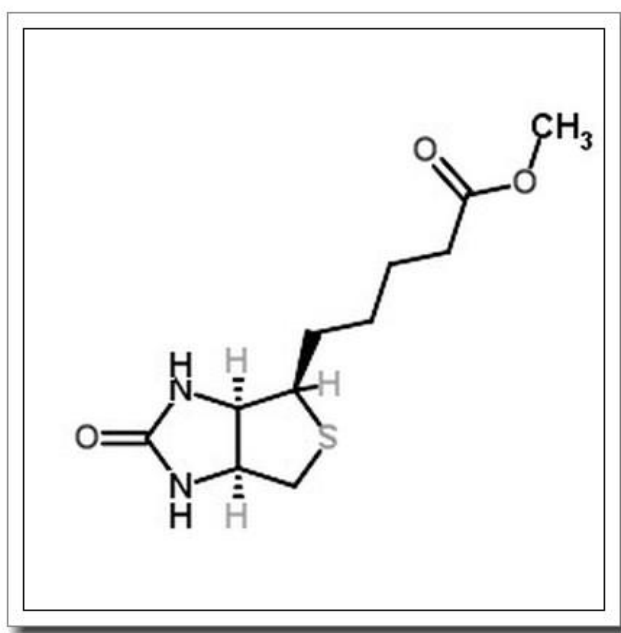


Methyl 5-[(3aR,4R,6aS)-2-oxohexahydro-1H-thieno[3,4-d]imidazol-4-yl]pentanoate

Methyl 5-[(3aR, 4R, 6aS)-2-oxohexahydro-1H-thieno[3, 4-d]imidazol-4-yl]pentanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-[(3aR, 4R, 6aS)-2-oxohexahydro-1H-thieno[3, 4-d]imidazol-4-yl]pentanoate
中文名称	Methyl 5-[(3aR, 4R, 6aS)-2-oxohexahydro-1H-thieno[3, 4-d]imidazol-4-yl]pentanoate
CAS 号	60562-11-0
分子式	C ₁₁ H ₁₈ N ₂ O ₃ S
分子量	258.337
纯度	>96%

产品说明

以下是根据您的要求撰写的专业产品说明:

1. 产品概述与化学特性

本产品为 Methyl 5-[(3aR, 4R, 6aS)-2-oxohexahydro-1H-thieno[3,4-d]imidazol-4-yl]pentanoate, 中文名称为甲基 5-[(3aR, 4R, 6aS)-2-氧代六氢-1H-噻吩并[3,4-d]咪唑-4-基]戊酸酯, CAS 号为 60562-11-0。其分子式为 C₁₁H₁₈N₂O₃S, 分子量为 258.337, 纯度经 HPLC 检测确认大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的立体构型 (3aR, 4R, 6aS), 在有机溶剂如甲醇、乙醇中具有中等溶解性, 水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

该分子结构中含有噻吩并咪唑酮核心和戊酸酯侧链, 使其成为生物素代谢途径中的重要中间体。其立体特异性结构在酶促反应中表现出显著的选择性, 可作为生物素合成酶的底物类似物或抑制剂。在辅酶 A 羧化反应研究中, 该化合物能模拟生物素-羧基载体蛋白的功能, 对研究维生素 H 代谢机制具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域: 作为生物化学研究的标准品用于 HPLC 定量分析; 在药物研发中作为生物素拮抗剂的合成前体; 在酶学研究中用于羧化酶抑制实验。具体可用于: 微生物培养实验中生物素代谢途径的调控; 开发新型抗肿瘤药物靶点研究; 作为诊断试剂组分用于某些遗传性生物素代谢缺陷疾病的检测。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃的干燥环境中, 避光保存于密封容器内。开封后建议充入惰性气体保护。使用时需恢复至室温再开封, 避免冷凝水影响。工作溶液建议现配现用, 溶剂首选无水 DMSO 或乙醇。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤和眼睛。

5. 质量控制与安全信息

本产品经严格的质量控制, 包括 NMR、HPLC 和质谱验证。重金属含量小于 10ppm,

水分含量低于 0.5%。安全数据表明该物质可能引起眼睛刺激，操作时应佩戴防护眼镜和手套。如意外接触，立即用大量清水冲洗至少 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品处置法规。建议在专业人员指导下使用，非实验室用途禁止使用。