

TERT-BUTYL (3S,5R)-5-(HYDROXYMETHYL)PYRROLIDIN-3-YLCARBAMATE Hydrochloride

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	TERT-BUTYL (3S, 5R)-5-(HYDROXYMETHYL)PYRROLIDIN-3-YLCARBAMATE Hydrochloride
产品目录号	
CAS 号	1865786-36-2
分子式	C ₁₀ H ₂₁ N ₂ O ₃
分子量	252.73834
纯度	>96%

产品说明

TERT-BUTYL (3S, 5R)-5-(HYDROXYMETHYL)PYRROLIDIN-3-YLCARBAMATE

Hydrochloride 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为叔丁基 (3S, 5R)-5-(羟甲基)吡咯烷-3-基氨基甲酸酯盐酸盐，分子式 $C_{10}H_{21}ClN_2O_3$ ，分子量 252.73834，CAS 号 1865786-36-2。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 测定大于 96%，具有明确的手性中心 (3S, 5R 构型)，易溶于水及极性有机溶剂 (如甲醇、DMSO)，在酸性条件下稳定。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吡咯烷衍生物类小分子，其结构中的羟甲基和氨基甲酸酯基团赋予其独特的生物活性。作为手性砌块，它常用于药物化学中靶向蛋白相互作用的设计，尤其适用于神经递质受体调节剂或酶抑制剂的合成。其立体构型对生物活性具有关键影响，因此在不对称合成和药物开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- 1) 医药研发：作为中间体用于合成抗阿尔茨海默病、帕金森病等中枢神经系统疾病候选药物。
- 2) 生物探针开发：通过修饰其官能团，可构建用于研究酶机制或细胞信号通路的分子工具。
- 3) 不对称催化：作为手性助剂参与立体选择性反应，如碳-碳键形成或氢化反应。

4. 储存条件与使用建议

储存于 $-20^{\circ}C$ 、干燥避光环境中，长期保存建议充氮密封。开封后需在干燥器内保存，避免反复冻融。使用时需在惰性气体 (如氩气) 保护下操作，若用于水溶液体系，建议现配现用。溶解前可轻微升温 ($\leq 40^{\circ}C$) 以加速溶解，但需避免高温导致结构降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）、核磁共振（NMR）和元素分析（EA）验证结构，HPLC 检测显示单一主峰。安全数据：

- 1) 危害提示：可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时需佩戴防护手套及护目镜。
- 2) 应急处理：接触皮肤后立即用大量清水冲洗，若吸入粉尘需转移至空气新鲜处。
- 3) 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排入下水道。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验体系进一步优化。