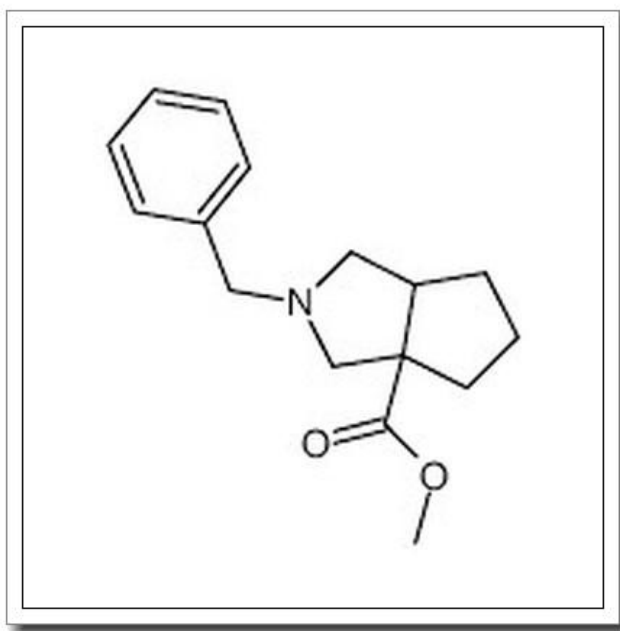


methyl (+/-)-(3aR)-2-(phenylmethyl)hexahydrocyclopenta[c]pyrrole-3a(1H)-carboxylate

methyl (+/-)-(3aR)-2-(phenylmethyl)hexahydrocyclopenta[c]pyrrole-3a(1H)-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl (+/-)-(3aR)-2-(phenylmethyl)hexahydrocyclopenta[c]pyrrole-3a(1H)-carboxylate
中文名称	methyl (+/-)-(3aR)-2-(phenylmethyl)hexahydrocyclopenta[c]pyrrole-3a(1H)-carboxylate
CAS 号	885958-43-0
分子式	C ₁₆ H ₂₁ N ₂ O ₂
分子量	259.343
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 methyl (+/-)-(3aR)-2-(phenylmethyl)hexahydrocyclopenta[c]pyrrole-3a(1H)-carboxylate, 化学式为 C₁₆H₂₁N₂O₂, 分子量 259.343, CAS 号为 885958-43-0。该化合物是一种具有特定立体构型的杂环衍生物, 纯度高于 96%, 外观通常为无色至淡黄色液体或固体。其结构包含苯甲基和六氢环戊并[c]吡咯环, 羧酸甲酯基团赋予其良好的溶解性和反应活性, 适用于有机合成及药物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体, 在生物活性分子构建中具有重要作用。其环戊并吡咯骨架常见于多种天然产物和药物分子中, 能够参与立体选择性合成, 尤其适用于神经活性化合物或酶抑制剂的研发。苯甲基的引入可调节脂溶性和靶标结合能力, 使其在药物先导物优化中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和精细化工领域。具体用途包括: 作为手性砌块用于不对称合成; 参与多肽模拟物的构建; 用于开发 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂或中枢神经系统药物。此外, 在催化反应中可作为配体前体或辅助剂, 提升反应效率和选择性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融或暴露于潮湿环境。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气) 下操作, 溶于二氯甲烷或 THF 等有机溶剂前需充分平衡至室温。实验人员应佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 >96%。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需在通风橱中进行。若不慎接触, 立即用大量清水冲

洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。运输时归类为非危险品，但需避免高温和剧烈震动。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。建议用户查阅最新文献或进行小试以确定最佳使用方案。