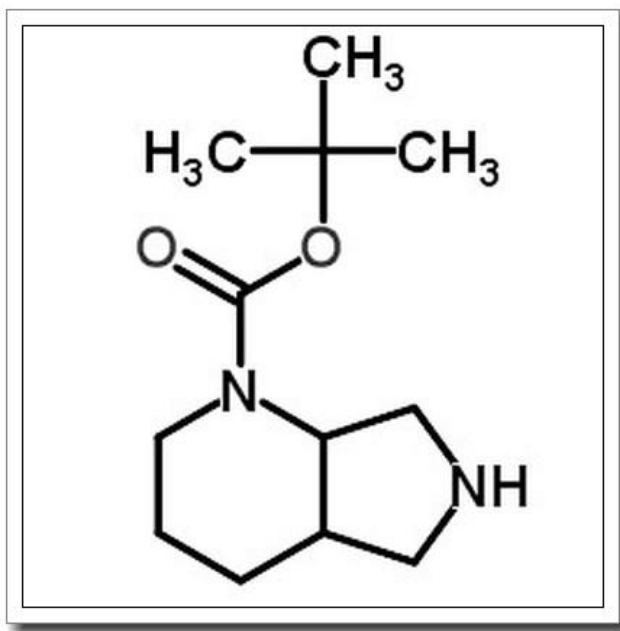


八氢吡咯并[3.4-b]吡啶-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl (4aS, 7aS)-2, 3, 4, 4a, 5, 6, 7, 7a-octahydropyrrolo[3, 4-b]pyridine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl (4aS, 7aS)-2, 3, 4, 4a, 5, 6, 7, 7a-octahydropyrrolo[3, 4-b]pyridine-1-carboxylate</i>
中文名称	八氢吡咯并[3.4-b]吡啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	159991-07-8
分子式	C ₁₂ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	226.315
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

八氢吡咯并[3,4-b]吡啶-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl (4aS,7aS)-2,3,4,4a,5,6,7,7a-octahydropyrrolo[3,4-b]pyridine-1-carboxylate) 是一种具有特定立体构型的杂环化合物, CAS 号为 159991-07-8, 分子式为 C₁₂H₂₂N₂O₂, 分子量为 226.315。该化合物以叔丁氧羰基 (Boc) 保护基修饰, 纯度高于 96%, 常温下为白色至类白色固体或油状液体, 具有较好的有机溶剂溶解性 (如甲醇、二氯甲烷等)。其结构中的八氢吡咯并吡啶骨架是药物化学中常见的优势片段, 常用于构建复杂生物活性分子。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类化合物的衍生物, 该产品在有机合成中可作为关键中间体, 尤其适用于含氮杂环药物的研发。Boc 保护基的引入显著增强了氨基的稳定性, 使其在酸性条件下易于脱保护, 同时兼容多种偶联反应。其立体特异性 (4aS,7aS 构型) 在不对称合成中具有重要价值, 常用于手性催化剂或配体的制备, 以及生物碱类天然产物的全合成。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发领域, 具体用途包括:

- 作为抗抑郁剂、抗病毒药物或神经递质调节剂的合成前体
- 用于构建多靶点激酶抑制剂的哌啶环核心结构
- 在农药化学中作为杀虫剂或杀菌剂的中间体
- 在材料科学中参与功能化聚合物的修饰

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氮气) 保护下密封保存, 储存温度 -20° C 至 4° C, 避免光照与潮湿环境。开封后需尽快使用, 剩余物料应充氮后重新密封。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水级有机溶剂, 反应体系中需严格控制水分含量以保护 Boc 基团稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，同时提供核磁共振（ ^1H NMR、 ^{13}C NMR）和质谱（MS）数据以确证结构。安全信息提示：该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统产生刺激，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，禁止直接排入环境。