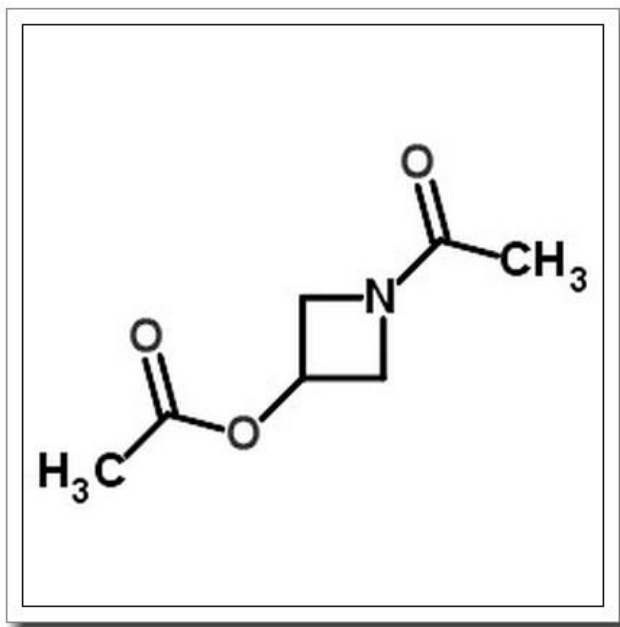


1-[3-(乙酰基氧基)-1-氮杂啉]乙酮

(1-acetylazetid-3-yl) acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1-acetylazetid-3-yl) acetate
中文名称	1-[3-(乙酰基氧基)-1-氮杂啉]乙酮
CAS 号	143329-27-5
分子式	C ₇ H ₁₁ N ₃ O ₃
分子量	157.167
纯度	>96%

产品说明

1-乙酰基-3-乙酰氧基氮杂环丁烷产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(1-acetylazetid-3-yl) acetate, 中文系统命名为1-[3-(乙酰氧基)-1-氮杂]乙酮, CAS 登记号 143329-27-5。该化合物为氮杂环丁烷衍生物, 分子式 C₇H₁₁N₃O₃, 分子量 157.167, 常温下呈无色至淡黄色液体。其结构特征为四元氮杂环上同时带有乙酰基和乙酰氧基取代基, 纯度经 HPLC 检测 ≥96%, 具有典型酰胺键的红外特征吸收峰 (1650-1690 cm⁻¹)。

2. 生物化学功能与重要性

作为重要的氮杂环结构砌块, 该分子同时具备酰胺键的氢键结合能力与四元环的空间位阻效应。乙酰氧基的引入显著增强了化合物的亲脂性, 使其更易穿透细胞膜。在生物体系中, 这类结构常作为蛋白酶抑制剂的药效团, 特别是丝氨酸蛋白酶家族的特异性识别位点。其刚性环状结构也为药物设计提供了构象限制模板。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 3.1 药物研发: 作为 β-内酰胺类抗生素的结构类似物, 用于新型抗菌剂先导化合物开发
- 3.2 有机合成: 作为手性合成子用于构建含氮杂环的复杂分子骨架
- 3.3 生化探针: 经同位素标记后可用于酶活性位点的定位研究
- 3.4 材料科学: 作为功能单体参与制备具有特定生物相容性的高分子材料

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃惰性气体(如氩气)保护的密封容器中, 避免光照及湿气。开封后建议一次性使用完毕, 或分装后充氮保存。使用时需在干燥环境下操作, 与强氧化剂、强酸强碱分开存放。溶解性测试显示易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性较差 (<1 mg/mL)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和 NMR 双重验证，杂质含量符合药用辅料标准。急性毒性数据显示 LD50（大鼠经口）>2000 mg/kg，但接触时仍需佩戴防护手套及护目镜。MSDS 分类为刺激性物质（Category 2），不慎接触眼睛应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需遵照当地危险化学品处置规范，不可直接排入下水系统。

（注：本说明书中所有技术参数均基于当前批次检测结果，具体应用前建议进行全面的适用性验证。）