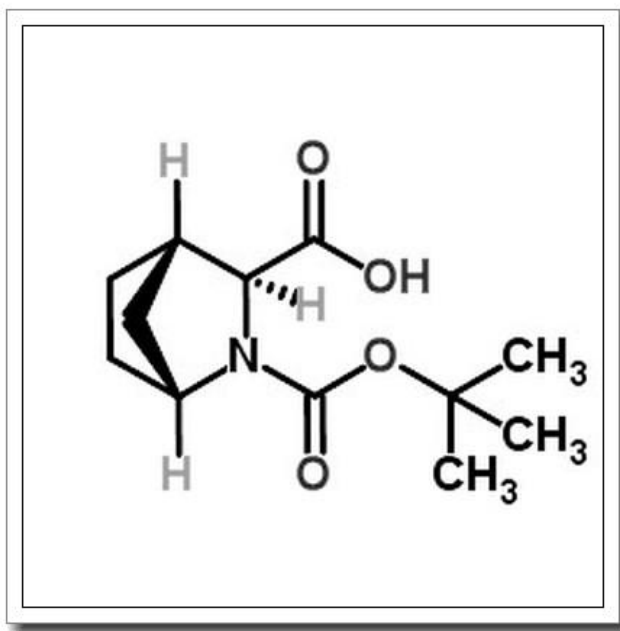


(1R,3S,4S)-N-Boc-2-氮杂双环[2.2.1]庚烷-3-羧酸

(1R, 3S, 4S)-N-Boc-2-azabicyclo[2.2.1]heptane-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 3S, 4S)-N-Boc-2-azabicyclo[2.2.1]heptane-3-carboxylic acid
中文名称	(1R, 3S, 4S)-N-Boc-2-氮杂双环[2.2.1]庚烷-3-羧酸
CAS 号	291775-59-2
分子式	C ₁₂ H ₁₉ N ₁ O ₄
分子量	241.284
纯度	>96%

产品说明

(1R, 3S, 4S)-N-Boc-2-氮杂双环[2.2.1]庚烷-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(1R, 3S, 4S)-N-Boc-2-氮杂双环[2.2.1]庚烷-3-羧酸，CAS 号 291775-59-2，分子式 C₁₂H₁₉N₀₄，分子量 241.284。其结构包含刚性双环骨架和 Boc 保护基团，具有立体专一性（1R, 3S, 4S 构型）。纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%，适用于高选择性有机合成与药物研发。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是重要的手性砌块，其双环结构可增强肽类或小分子药物的构象稳定性。Boc 保护基团在酸性条件下可选择性脱除，便于后续官能团修饰。在药物化学中，此类氮杂双环结构常用于设计蛋白酶抑制剂、神经递质类似物及 GPCR 靶向化合物，具有改善生物利用度和代谢稳定性的潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发：作为中间体用于合成抗病毒、抗肿瘤及中枢神经系统药物。
- 肽类模拟物：构建受限二级结构（如 β-转角模拟物），增强肽类药物的靶向性。
- 不对称合成：作为手性助剂或催化剂配体，参与立体选择性反应。
- 学术研究：用于研究双环体系对药物构效关系的影响。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于-20° C 干燥避光环境中，开封后需充惰性气体保存。
- 使用前恢复至室温以避免吸湿，建议在手套箱或通风橱中操作。
- 溶解性：易溶于二氯甲烷、THF，微溶于甲醇，不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC、NMR 和质谱验证纯度与结构，批号关联完整分析证书。
- 安全提示：穿戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘。如接触皮肤，立即用大量清

水冲洗。

- 废弃物处理：按危险化学品规范处置，遵守当地环保法规。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需结合实验方案优化条件。