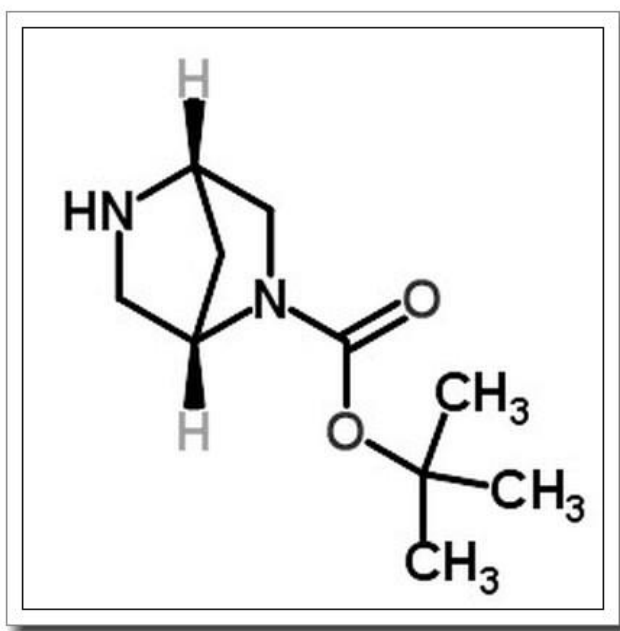


# (1R,4R)-2,5-二氮杂双环[2.2.1]庚烷-2-羧酸叔丁基酯

*(1R, 4R)-5-N-Boc-2, 5-diazabicyclo[2. 2. 1]heptane*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 4R)-5-N-Boc-2, 5-diazabicyclo[2. 2. 1]heptane
中文名称	(1R, 4R)-2, 5-二氮杂双环[2. 2. 1]庚烷-2-羧酸叔丁基酯
CAS 号	134003-84-2
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	198. 262
纯度	>96%

## 产品说明

### (1R, 4R) -5-N-Boc-2, 5-二氮杂双环[2. 2. 1]庚烷产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(1R, 4R)-5-N-Boc-2, 5-diazabicyclo[2. 2. 1]heptane, 中文系统命名为(1R, 4R)-2, 5-二氮杂双环[2. 2. 1]庚烷-2-羧酸叔丁基酯, CAS 注册号 134003-84-2。其分子式为 C<sub>10</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量 198. 262, 是一种具有刚性双环结构的含氮杂环化合物。叔丁氧羰基 (Boc) 保护基的引入显著增强了其稳定性, 纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 表现为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷和四氢呋喃。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性双环骨架, 在药物化学中具有关键价值。其刚性结构可有效限制分子构象自由度, 常用于构建靶向 GPCRs (G 蛋白偶联受体) 或酶抑制剂的药效团。Boc 保护基在固相肽合成 (SPPS) 和多步有机合成中提供选择性脱保护优势, 与酸敏感性官能团兼容性良好。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品是合成抗抑郁药物、神经递质调节剂的重要中间体, 尤其用于构建含二氮杂双环核心的候选化合物。在不对称催化中, 可作为手性配体的前体。此外, 在材料科学中用于制备功能性高分子单体。典型应用案例包括:

- 帕金森病治疗药物分子片段合成
- 组织蛋白酶 K 抑制剂的结构修饰
- 非天然氨基酸的立体选择性构建

#### 4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃惰性气体 (如氩气) 环境中, 短期使用可保存于 2-8℃干燥器。开封后需充氮密封, 避免反复冻融。溶解时优先选用无水级溶剂, 并在通风橱中操作。反应投料建议在水无氧条件下进行, Boc 脱保护可使用三氟乙酸/二氯甲烷 (1:1) 体系。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和 NMR 双重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。急性毒性数据（LD50 大鼠口服）>2000 mg/kg，操作时需佩戴护目镜和丁腈手套。MSDS 显示其可能引起轻微眼部刺激，意外接触时需用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理法规，不可直接排入下水系统。

（注：具体实验参数请根据实际工艺条件优化，本说明基于现有研究数据更新至 2023 年 12 月）