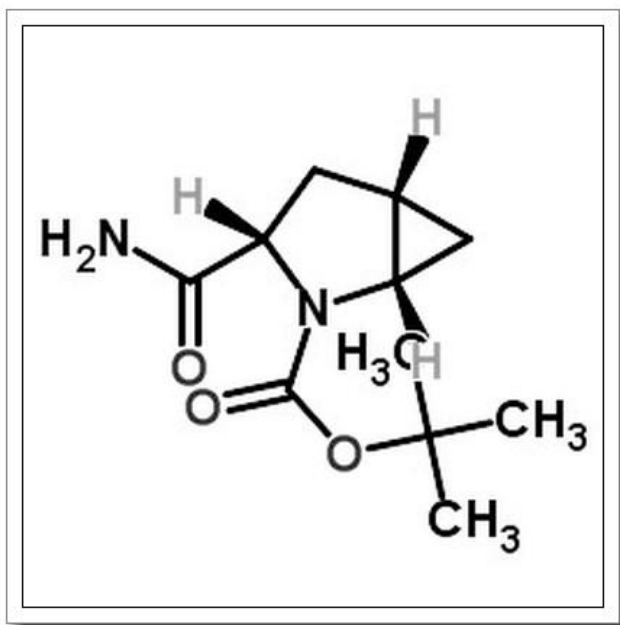


# (1S,3S,5S)-3-(氨基羰基)-2-氮杂双环 [3.1.0]己烷-2-甲酸叔丁酯

*(1S, 3S, 5S)-tert-Butyl 3-carbamoyl-2-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(1S, 3S, 5S)-tert-Butyl 3-carbamoyl-2-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylate
中文名称	(1S, 3S, 5S)-3-(氨基羰基)-2-氮杂双环[3.1.0]己烷-2-甲酸叔丁酯
CAS 号	361440-67-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量	226.272
纯度	>96%

## 产品说明

### (1S, 3S, 5S)-3-(氨基羰基)-2-氮杂双环[3.1.0]己烷-2-甲酸叔丁酯产品说明

#### 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(1S, 3S, 5S)-tert-Butyl 3-carbamoyl-2-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylate，CAS 号为 361440-67-7，分子式 C<sub>11</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>，分子量 226.272。其结构中含有刚性双环骨架和叔丁氧羰基（Boc）保护基团，纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%。该化合物具有立体专一性（1S, 3S, 5S 构型），在有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）和甲醇中具有中等溶解性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为双环[3.1.0]己烷衍生物，其刚性结构可模拟肽链的构象限制，常用于药物设计中调节分子构象和增强靶标结合能力。氨基羰基和 Boc 保护基的存在使其成为合成复杂生物活性分子（如蛋白酶抑制剂或 GPCR 配体）的关键中间体。在药物化学领域，此类结构常用于优化化合物的代谢稳定性和生物利用度。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发领域，具体包括：

- 作为手性砌块用于合成小分子药物候选化合物；
- 用于构建含氮杂双环结构的生物活性分子，如抗病毒或抗肿瘤药物；
- 在肽类模拟物设计中作为构象限制元件；
- 作为有机合成中间体参与多步反应，例如 Boc 脱保护后进一步功能化。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥保存，长期储存需充入惰性气体。开封后需密封防潮，避免反复冻融。使用时应在干燥环境下操作，溶解建议选用无水 DMSO（浓度 ≤10 mM），后续稀释可用水或缓冲液（注意可能产生轻微浑浊）。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱分析验证，符合研发级标准。操作时需佩戴防护手套和

护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。化学废弃物处置需符合当地法规。安全数据表（SDS）可随货提供或另行索取。

注：本品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。