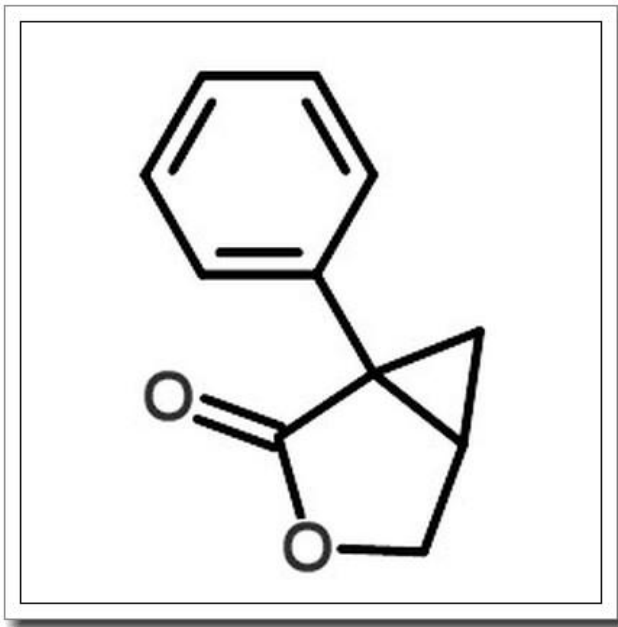


(1S,5R)-1-苯基-3-氧杂双环[3.1.0]己-2-酮

1-Phenyl-3-oxabicyclo[3.1.0]hexan-2-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Phenyl-3-oxabicyclo[3.1.0]hexan-2-one
中文名称	(1S, 5R)-1-苯基-3-氧杂双环[3.1.0]己-2-酮
CAS 号	63106-93-4
分子式	C ₁₁ H ₁₀ O ₂
分子量	174.196
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Phenyl-3-oxabicyclo[3.1.0]hexan-2-one (CAS 号: 63106-93-4) 是一种具有双环结构的有机化合物, 分子式为 C₁₁H₁₀O₂, 分子量为 174.196。其化学名称 (1S, 5R)-1-苯基-3-氧杂双环[3.1.0]己-2-酮表明该分子包含一个苯基取代基和一个氧杂双环骨架, 具有特定的立体构型。该化合物为无色至淡黄色液体或固体, 纯度通常高于 96%, 在有机合成中作为重要的中间体使用。其独特的双环结构赋予其较高的反应活性, 尤其在不对称合成和药物化学领域具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其刚性双环结构和手性中心, 在生物活性分子设计中常作为关键骨架。其分子中的酮基和氧杂环结构可参与多种亲核加成和环化反应, 是构建复杂杂环化合物的理想模块。在药物研发中, 此类结构常出现在抗菌、抗炎及神经活性分子的核心片段中, 能够显著影响分子的药代动力学性质和靶标结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药中间体合成、不对称催化反应及材料科学领域。在药物化学中, 可用于合成 β -内酰胺类抗生素类似物或作为手性助剂; 在材料科学中, 其刚性结构可用于制备高性能聚合物单体。此外, 在学术研究中, 它常作为探针分子用于研究环化反应机理或酶催化过程的模型底物。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氮气) 保护下密封储存, 温度控制在 2-8°C 以避免降解。开封后需尽快使用, 剩余物料应充氮保存。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强氧化剂或酸碱接触。溶解性测试表明其易溶于有机溶剂 (如 DMSO、THF), 推荐在通风橱中配制溶液。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 >96%。安全数据表明其具有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具。若不慎接触皮肤, 需立即用大量清水

冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，建议通过专业危废机构处置。详细毒理学数据可参考材料安全数据表（MSDS）。