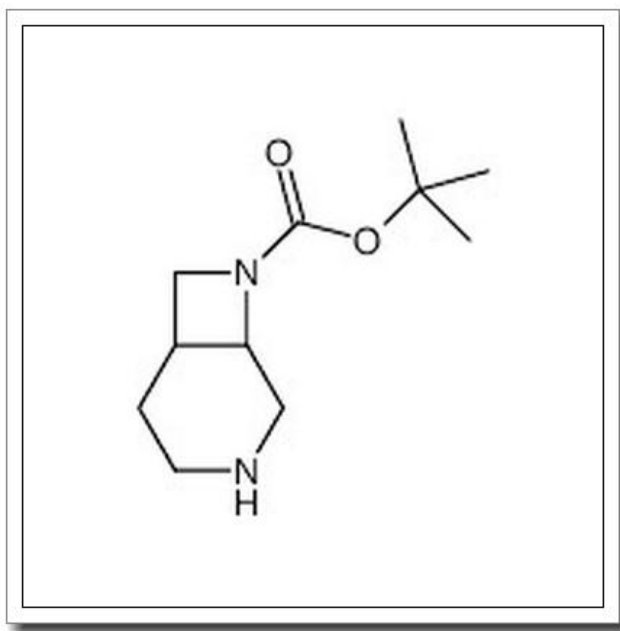


(1S,6r)-8-boc-3,8-二氮杂双环[4.2.0]辛烷

tert-butyl (1R, 6S)-4, 7-diazabicyclo[4. 2. 0]octane-7-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl (1R, 6S)-4, 7-diazabicyclo[4. 2. 0]octane-7-carboxylate
中文名称	(1S, 6r)-8-boc-3, 8-二氮杂双环[4. 2. 0]辛烷
CAS 号	851526-80-2
分子式	C ₁₁ H ₂₀ N ₂ O ₂
分子量	212. 289
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(1S, 6r)-8-boc-3, 8-二氮杂双环[4. 2. 0]辛烷 (CAS 号: 851526-80-2) 是一种具有特定立体构型的双环胺类化合物, 化学名称为 tert-butyl (1R, 6S)-4, 7-diazabicyclo[4. 2. 0]octane-7-carboxylate。其分子式为 C₁₁H₂₀N₂O₂, 分子量为 212. 289, 纯度通常高于 96%。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 具有较高的化学稳定性, 其结构中的 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团使其在有机合成中易于脱保护和进一步修饰。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为双环胺类衍生物, 在药物化学和生物化学中具有重要作用。其刚性双环结构能够提供特定的空间构象, 常用于构建复杂分子骨架。Boc 保护基的存在使其成为多肽合成和杂环化合物制备中的关键中间体, 尤其在 β-内酰胺类抗生素和神经活性分子的合成中表现出显著价值。

3. 主要应用领域与具体用途

(1S, 6r)-8-boc-3, 8-二氮杂双环[4. 2. 0]辛烷广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为手性砌块用于不对称合成; 参与构建具有生物活性的氮杂环化合物; 在药物分子设计中用于优化药效团的空间排列。此外, 它还可作为催化剂配体或酶抑制剂的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度为 2-8°C。长期保存需充入惰性气体 (如氮气) 以延长稳定性。使用前需恢复至室温并避免吸湿。操作时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风良好的环境下进行。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。

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, 该物质可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需避免直接接触。如不慎接触, 应立即用大量清水冲

洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，建议通过专业机构进行无害化处置。运输时需分类为一般化学品，避免与强氧化剂混装。