

2,5-二氮杂双环[2.2.2]辛烷双盐酸盐

2,5-diazabicyclo[2.2.2]octane, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,5-diazabicyclo[2.2.2]octane, hydrochloride
中文名称	2,5-二氮杂双环[2.2.2]辛烷双盐酸盐
CAS 号	1192-92-3
分子式	C ₆ H ₁₃ ClN ₂
分子量	148.634
纯度	>96%

产品说明

2,5-二氮杂双环[2.2.2]辛烷双盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,5-二氮杂双环[2.2.2]辛烷双盐酸盐（CAS 号：1192-92-3）是一种具有双环结构的含氮有机化合物，分子式为 $C_6H_{13}Cl_2N_2$ ，分子量 148.634。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在，易溶于水和极性有机溶剂，纯度标准 >96%。其独特的双环[2.2.2]辛烷骨架赋予分子刚性结构，而两个氮原子的存在使其具备良好的配位能力和碱性特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为双齿配体，该化合物可通过氮原子与金属离子形成稳定络合物，在催化反应中发挥关键作用。其刚性结构有助于固定分子构象，在药物化学中常用于构建靶向蛋白的桥连结构。此外，其盐酸盐形式提高了水溶性和储存稳定性，适用于生物缓冲体系及酶反应研究。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品是合成抗肿瘤药物和神经递质调节剂的重要中间体。材料科学中用于制备金属有机框架（MOFs）和功能化聚合物。实验室研究方面，可作为核磁共振位移试剂、相转移催化剂，以及蛋白质结晶的添加剂。具体应用案例包括：钯催化偶联反应的配体、DNA 切割试剂的辅助组分。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存于 2-8°C 环境中，开封后需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤和眼睛。配制成溶液后建议现配现用，长期水溶液储存需调节 pH 至 3-5 以保持稳定性。与强氧化剂、强酸需隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和元素分析进行批次质量控制，水分含量控制在 <0.5%。安全数据表明其属于刺激性化学品（GHS 分类：Eye Irrit. 2），操作时应佩戴护目

镜和防尘口罩。如发生接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定，不可直接排入下水系统。

（注：本说明基于当前研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。技术参数更新恕不另行通知。）