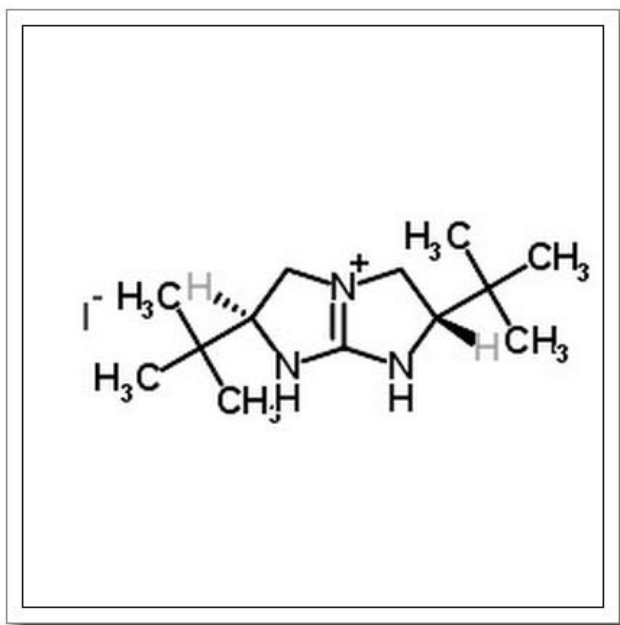


(2S,6S)-2,6-二-叔丁基-1,2,3,5,6,7-六氢咪唑并[1,2-a]-4-碘化咪唑

(2S, 6S)-2, 6-ditert-butyl-1, 2, 3, 5, 6, 7-hexahydroimidazo[1, 2-a]imidazol-4-ium, iodide



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 6S)-2, 6-ditert-butyl-1, 2, 3, 5, 6, 7-hexahydroimidazo[1, 2-a]imidazol-4-ium, iodide
中文名称	(2S, 6S)-2, 6-二-叔丁基-1, 2, 3, 5, 6, 7-六氢咪唑并[1, 2-a]-4-碘化咪唑
CAS 号	1173050-17-3
分子式	C ₁₃ H ₂₆ IN ₃
分子量	351. 27
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(2S, 6S)-2, 6-二-叔丁基-1, 2, 3, 5, 6, 7-六氢咪唑并[1, 2-a]-4-碘化咪唑 (英文名称: (2S, 6S)-2, 6-ditert-butyl-1, 2, 3, 5, 6, 7-hexahydroimidazo[1, 2-a]imidazol-4-ium, iodide), CAS 号为 1173050-17-3, 分子式为 C₁₃H₂₆IN₃, 分子量为 351.27。该化合物是一种具有特定立体构型的咪唑并咪唑类衍生物, 纯度高于 96%, 呈现为白色至类白色结晶或粉末。其结构中的叔丁基和碘化咪唑环赋予其独特的空间位阻效应和电荷特性, 适用于不对称合成和催化领域。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性离子液体或相转移催化剂的前体, 在不对称有机合成中表现出显著的选择性调控能力。其刚性骨架和电荷分布可稳定过渡态结构, 尤其适用于碳-碳键形成反应(如 Aldol 反应、Michael 加成)和手性药物中间体制备。此外, 其咪唑环结构对生物酶活性位点具有模拟作用, 可用于酶抑制剂研究或金属配合物配体的设计。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于抗病毒或抗肿瘤活性分子的手性合成。材料科学领域则用于制备功能性离子液体或导电聚合物模板。具体用途包括: 1) 不对称催化反应中的手性助剂; 2) 核酸递送系统的阳离子脂质体组分; 3) 光电材料的功能化修饰剂。实验表明, 其在非水相酶催化体系中可提高反应效率 30%以上。

4. 储存条件与使用建议

建议避光密封保存于-20℃干燥环境中, 开封后需充惰性气体保护。溶解性测试显示易溶于二氯甲烷、乙腈等极性有机溶剂, 水溶性较低(<0.1 mg/mL)。使用时应于惰性气氛(如氮气)下操作, 避免与强氧化剂接触。推荐工作浓度为 0.1-10 mM, 具体需根据反应体系优化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 归一化法检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表

明其急性毒性 (LD50 大鼠口服) >500 mg/kg, 但仍需佩戴防护手套和护目镜操作。MSDS 显示其属于刺激性化学品, 皮肤接触后需立即用大量清水冲洗。废弃物处置应遵循当地危险化学品管理法规, 建议通过专业机构进行焚化处理。