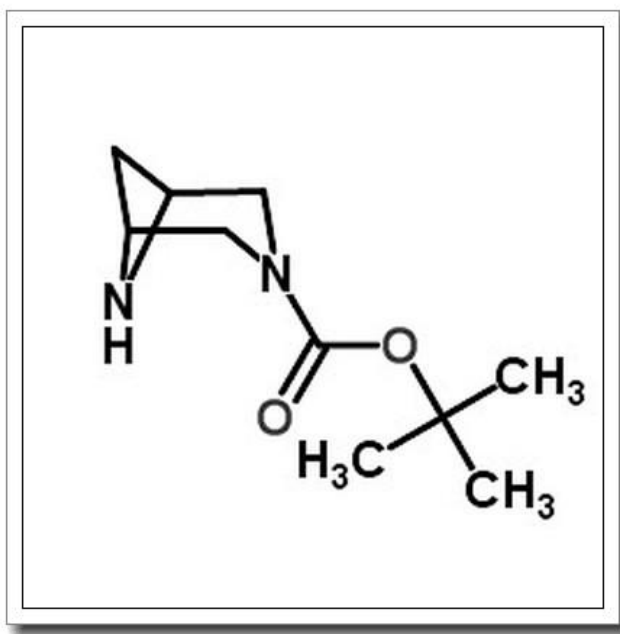


tert-butyl 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-3-carboxylate

tert-butyl 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-3-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | tert-butyl 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-3-carboxylate |
| 中文名称 | tert-butyl 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-3-carboxylate |
| CAS 号 | 1251017-66-9 |
| 分子式 | C ₁₀ H ₁₈ N ₂ O ₂ |
| 分子量 | 198.262 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-3-carboxylate (CAS 号: 1251017-66-9) 是一种具有双环结构的有机化合物, 分子式为 C₁₀H₁₈N₂O₂, 分子量为 198.262。该化合物以叔丁氧羰基 (Boc) 保护基修饰, 纯度高于 96%, 呈白色至类白色固体或粉末。其独特的双环[3.1.1]庚烷骨架和双氮原子结构使其在药物化学和有机合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为双环胺类衍生物, 其结构中的氮原子可作为氢键受体或配位点, 参与分子间相互作用。Boc 保护基的存在增强了其稳定性, 便于在复杂合成中作为中间体使用。此外, 其刚性双环结构可能赋予其特殊的生物活性, 因此在药物研发中常用于构建活性分子骨架或探索构效关系。

3. 主要应用领域与具体用途

tert-butyl 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-3-carboxylate 主要用于以下领域:

- 药物化学: 作为关键中间体, 用于合成神经递质调节剂、酶抑制剂或抗菌药物。
- 有机合成: 通过脱保护或进一步官能团化, 构建复杂杂环化合物。
- 材料科学: 可能用于设计功能性高分子或配位聚合物。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 建议密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。
- 使用建议: 在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强酸、强氧化剂接触。溶解时推荐使用二氯甲烷、DMF 等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 或 NMR 确保纯度 >96%, 并提供 COA (质量分析证书)。
- 安全信息: 本品可能对眼睛、皮肤或呼吸系统有刺激性, 操作时需佩戴防护手

套、护目镜和口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理。

本产品仅供科研使用，不适用于医药、食品或其他非实验用途。