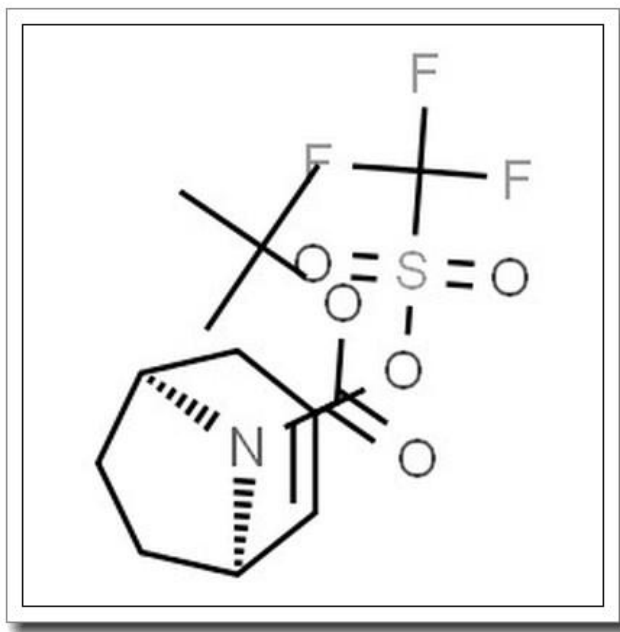


# tert-butyl 3-(trifluoromethylsulfonyloxy)-8-azabicyclo[3.2.1]oct-2-ene-8-carboxylate

*(1R, 5S)-tert-butyl 3-(trifluoromethylsulfonyloxy)-8-azabicyclo[3.2.1]oct-2-ene-8-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 5S)-tert-butyl 3-(trifluoromethylsulfonyloxy)-8-azabicyclo[3.2.1]oct-2-ene-8-carboxylate
中文名称	tert-butyl 3-(trifluoromethylsulfonyloxy)-8-azabicyclo[3.2.1]oct-2-ene-8-carboxylate
CAS 号	1245646-51-8

分子式	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> F <sub>3</sub> N <sub>0</sub> O <sub>5</sub> S
分子量	357.35
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

(1R, 5S)-tert-butyl 3-(trifluoromethylsulfonyloxy)-8-azabicyclo[3.2.1]oct-2-ene-8-carboxylate (CAS 号: 1245646-51-8) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为  $C_{13}H_{18}F_3N_1O_5S$ , 分子量为 357.35。该化合物属于 8-氮杂双环[3.2.1]辛烷衍生物, 结构中包含一个三氟甲磺酸酯基团 ( $-OSO_2CF_3$ ) 和一个叔丁氧羰基 (Boc) 保护基。其立体构型为 (1R, 5S), 纯度高于 96%, 适合用于高选择性合成反应。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成中作为关键中间体, 尤其适用于构建复杂氮杂环骨架。三氟甲磺酸酯基团是优良的离去基团, 可参与亲核取代、偶联反应等, 而 Boc 基团为氨基提供了保护, 增强了化合物的稳定性。其独特的双环结构在药物化学中具有重要意义, 常用于生物碱类化合物或神经活性分子的合成。

### 3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 用于合成具有生物活性的氮杂双环化合物, 如镇痛剂或神经调节剂的前体。
- 有机合成: 作为三氟甲磺酸酯化试剂, 参与过渡金属催化的交叉偶联反应 (如 Suzuki、Negishi 反应)。
- 材料科学: 用于制备功能性高分子或配体, 优化催化体系的性能。

### 4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 建议在  $-20^{\circ}C$  下避光保存, 置于干燥、惰性气体 (如氮气) 环境中, 以防止吸湿或分解。
- 使用建议: 操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 建议使用前进行氮气保护以维持稳定性。

## 5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：产品通过 HPLC 和 NMR 验证，纯度>96%，并提供批次分析报告。
- 安全信息：该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，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。废弃物应按照国家有机卤化物标准处理，避免环境污染。

以上信息基于现有实验数据，具体应用需结合用户实验条件优化。