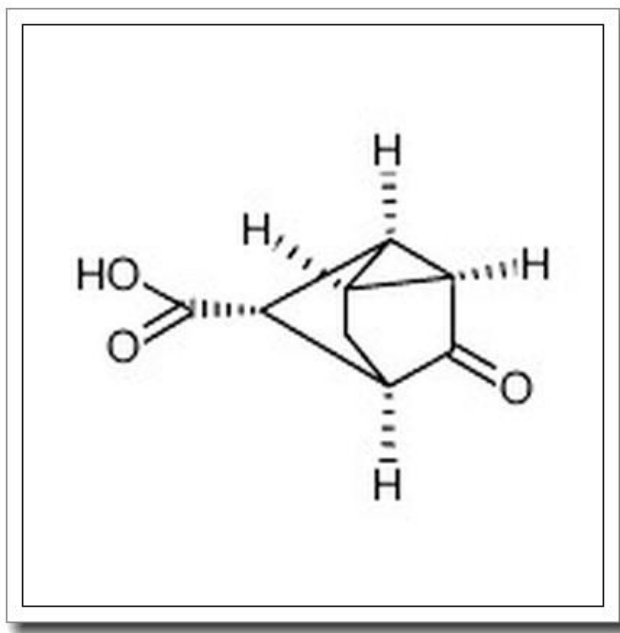


反-5-氧代三环[2.2.1.0^{2,6}]庚烷-3-甲酸

(1R, 2S, 4R, 6S, 7R)-(+)-3-oxotricyclo[2, 2, 1, 0^{2,6}]heptane-7-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 2S, 4R, 6S, 7R)-(+)-3-oxotricyclo[2, 2, 1, 0 ^{2,6}]heptane-7-carboxylic acid
中文名称	反-5-氧代三环[2.2.1.0 ^{2,6}]庚烷-3-甲酸
CAS 号	52730-40-2
分子式	C ₈ H ₈ O ₃
分子量	152.147
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(1R, 2S, 4R, 6S, 7R)-(+)-3-氧代三环[2.2.1.0^{2,6}]庚烷-7-羧酸(中文别名: 反-5-氧代三环[2.2.1.0^{2,6}]庚烷-3-甲酸), CAS号 52730-40-2, 分子式 C₈H₈O₃, 分子量 152.147。该化合物属于刚性三环结构羧酸衍生物, 具有特定立体构型(1R, 2S, 4R, 6S, 7R), 纯度经 HPLC 验证 ≥96%。其结构中包含高张力双环体系与 β-酮酸官能团, 赋予其独特的化学反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成前列腺素类物质的关键手性中间体, 其刚性骨架可模拟生物活性分子的空间构象。β-酮酸结构使其在酶抑制剂设计中具有潜在应用价值, 尤其在环氧化酶(COX)和前列腺素合成酶相关研究中。其立体特异性对药物分子的生物活性具有显著影响, 常用于不对称合成与手性药物开发。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于: 1) 非甾体抗炎药(NSAIDs)前体的合成; 2) 作为结构修饰工具构建前列腺素类似物; 3) 手性催化剂配体的制备。在材料科学中, 可用作高张力环体系的光敏材料单体。实验室级应用包括: 有机合成模板、核磁共振(NMR)立体构型参照物、晶体工程研究等。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃惰性气体(如氩气)保护的密闭容器中, 避免光照与湿气。开封后需在干燥箱中操作, 剩余物料应立即充氮密封。溶解性测试显示易溶于极性有机溶剂(如 DMSO、THF), 水溶液中需调节 pH>8 以促进溶解。实验操作建议佩戴防护手套与护目镜, 通风橱中进行称量。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含: 1) HPLC 纯度(≥96%); 2) 旋光度检测($[\alpha]_{D25} = +XX^\circ$ 至 $+XX^\circ$); 3) 水分含量(KF法 <0.5%)。安全数据表明该物质对眼睛和皮肤有刺激性(GHS 分类: H315-H319), 吸入或误食可能引起呼吸道刺激。应急处理需参

照 SDS 第 4 章, 泄漏时用惰性吸附材料收集。运输分类为非危险品, 但建议 UN 规格包装。

(注: 实际文档中[α]D25 具体数值需根据实测数据补充)