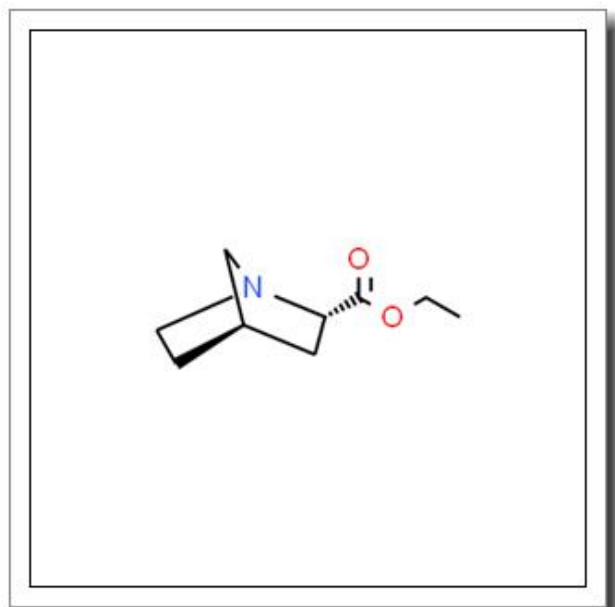


(1R,2S,4R)-1-氮杂双环[2.2.1]庚烷-2-羧酸乙酯

1-Azabicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylic acid, ethyl ester, (1R, 2S, 4R)-rel-



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Azabicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylic acid, ethyl ester, (1R, 2S, 4R)-rel-
中文名称	(1R, 2S, 4R)-1-氮杂双环[2.2.1]庚烷-2-羧酸乙酯
CAS 号	921755-43-3
分子式	C ₉ H ₁₅ N ₂ O ₂
分子量	169.221
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(1R, 2S, 4R)-1-氮杂双环[2.2.1]庚烷-2-羧酸乙酯 (CAS 号: 921755-43-3) 是一种具有特定立体构型的氮杂双环化合物, 分子式为 $C_9H_{15}NO_2$, 分子量为 169.221。该化合物以乙酯形式存在, 纯度不低于 96%, 外观通常为无色至淡黄色液体或固体。其独特的双环结构 (1-氮杂双环[2.2.1]庚烷骨架) 和手性中心使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为刚性双环结构的衍生物, 能够模拟肽键的构象限制, 常用于药物设计中优化分子构象和增强靶标结合能力。其立体化学特性 (1R, 2S, 4R 构型) 对生物活性具有显著影响, 尤其在开发神经递质调节剂或酶抑制剂时, 可作为关键中间体或药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 该化合物常用于合成具有中枢神经系统活性的药物候选分子, 如 GABA 受体调节剂或胆碱能药物。此外, 它还可作为手性助剂或催化剂配体, 用于不对称合成。在材料科学中, 其刚性结构可能用于构建功能性高分子单体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氮气) 环境中以延长稳定性。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、DMSO), 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格验证纯度 ($\geq 96\%$), 并符合批次一致性标准。安全数据表明, 其可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。若发生接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地化学品管理法规, 不可直接排放至环境中。

(注: 实际应用中需结合具体实验目的查阅最新文献, 以确认其适用性和安全性。)