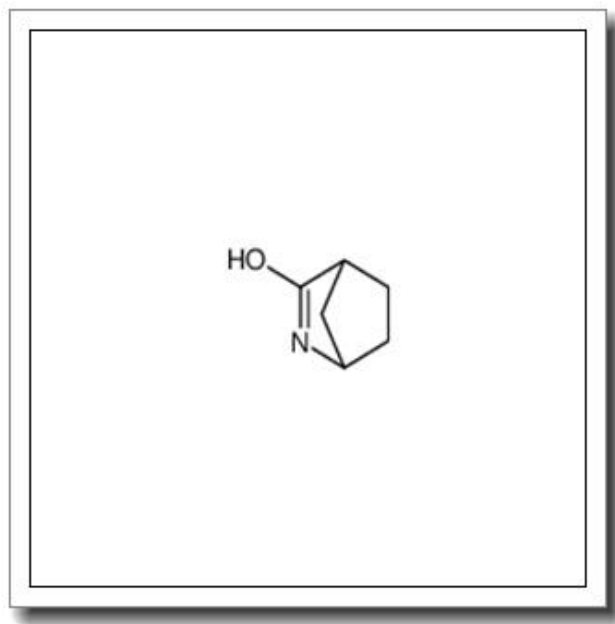


# 2-氮杂双环[2,2,1]庚-3-酮

*3-azabicyclo[2.2.1]heptan-2-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-azabicyclo[2.2.1]heptan-2-one
中文名称	2-氮杂双环[2,2,1]庚-3-酮
CAS 号	24647-29-8
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>0</sub>
分子量	111.142
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 3-氮杂双环[2.2.1]庚-2-酮产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 3-azabicyclo[2.2.1]heptan-2-one (CAS 24647-29-8)，是一种含氮双环杂环化合物，分子式 C<sub>6</sub>H<sub>9</sub>N<sub>0</sub>，分子量 111.142。其结构以双环[2.2.1]庚烷为骨架，在 1 位和 4 位桥连氮原子与羰基，形成刚性稠环体系。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96%，具有典型酰胺类化合物的极性特征，可溶于多数有机溶剂如甲醇、二氯甲烷，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为高张力双环骨架的核心结构单元，在药物化学中具有显著价值。其刚性构象可增强靶标分子结合的立体选择性，而内酰胺结构则参与氢键相互作用，常用于设计蛋白酶抑制剂或神经递质类似物。在天然产物全合成中，该结构是构建托品烷类生物碱的关键中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域：用于镇痛剂、抗胆碱能药物及中枢神经系统调节剂的先导化合物优化。

材料科学：作为手性助剂参与不对称合成，或改性高分子材料的交联剂。

学术研究：在酶抑制机理研究中作为模型底物，亦用于新型杂环化合物的结构拓展。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于阴凉干燥处（建议 2-8℃ 避光保存），避免与强氧化剂接触。使用时需在通风橱中操作，建议佩戴护目镜与丁腈手套。开封后建议充氮保护以延长稳定性，长期储存需定期检测纯度（HPLC 法）。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品经 GC-MS 和核磁共振谱（<sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C NMR）验证结构，HPLC 检测纯度 ≥96%。潜在危害包括眼睛刺激（GHS 分类 Category 2）和皮肤致敏风险，应急处理时需用大量

清水冲洗接触部位。安全数据表 (SDS) 包含详细毒理学数据 (LD50 oral rat >500 mg/kg), 运输分类为非危险品, 但建议按一般化学品规范管理。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新文献确认适用性。