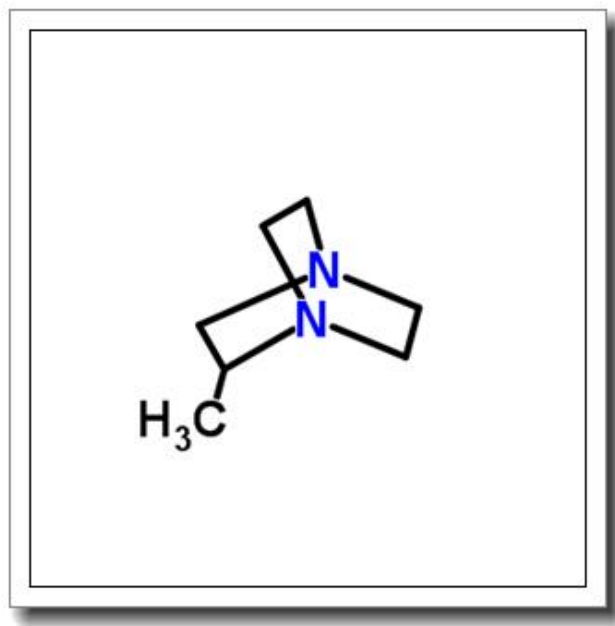


2-甲基-1,4-二氮杂双环[2.2.2]辛烷

3-methyl-1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-methyl-1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane
中文名称	2-甲基-1,4-二氮杂双环[2.2.2]辛烷
CAS 号	1193-66-4
分子式	C ₇ H ₁₄ N ₂
分子量	126.2
纯度	≥96%

产品说明

3-甲基-1,4-二氮杂双环[2.2.2]辛烷产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-甲基-1,4-二氮杂双环[2.2.2]辛烷 (CAS 号: 1193-66-4) 是一种具有双环结构的含氮有机化合物, 分子式为 $C_7H_{14}N_2$, 分子量 126.2。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的叔胺类碱性特征。其独特的双环[2.2.2]辛烷骨架赋予分子高度刚性结构, 而 1,4-二氮杂位点的甲基化修饰进一步增强了其疏水性。

2. 生物化学功能与重要性

作为双环叔胺类化合物, 该分子在生物化学领域主要作为有机合成中间体及配体使用。其氮原子孤对电子可参与金属配位, 在催化反应中作为辅助配体。此外, 结构中的空间位阻效应使其在不对称合成中表现出特殊选择性, 尤其在构建手性杂环化合物时具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品是合成抗疟疾药物奎宁类衍生物的关键砌块; 在材料科学领域, 可用于制备具有光致变色特性的功能材料。实验室级应用包括:

- 过渡金属催化反应的配体
- 高分子聚合反应的碱性添加剂
- 超分子化学中的结构单元
- 分析化学中的离子对试剂

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于阴凉干燥处, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 避免与强氧化剂、酸性物质接触。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试表明, 本品易溶于氯仿、二氯甲烷等有机溶剂, 微溶于水 ($<0.1 \text{ g}/100 \text{ mL}$, $25^{\circ}C$)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度，批号相关 COA 可随货提供。安全数据表明其急性毒性 LD50（大鼠经口）为 320 mg/kg，属于有害物质（GHS 分类：H302）。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，不可直接排入下水系统。如接触皮肤，应立即用大量清水冲洗至少 15 分钟，并寻求医疗建议。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。产品规格可能因批次略有差异，请以实际检测报告为准。