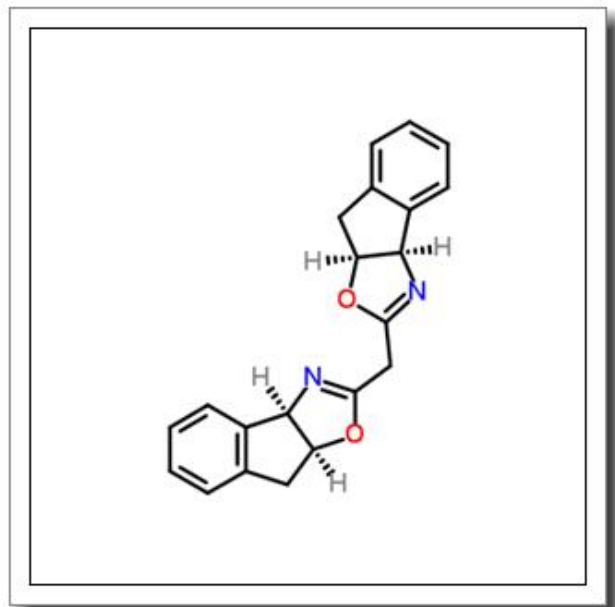


(+)-2,2'-亚甲基双[(3aR,8aS)-3a,8a-二氢-8H-茛苳苯[1,2-d]并恶唑

(+)-2,2'-Methylenebis[(3aR,8aS)-3a,8a-dihydro-8H-indeno[1,2-d]oxazole]



产品基本信息

属性	值
化学名称	(+)-2,2'-Methylenebis[(3aR,8aS)-3a,8a-dihydro-8H-indeno[1,2-d]oxazole]
中文名称	(+)-2,2'-亚甲基双[(3aR,8aS)-3a,8a-二氢-8H-茛苳苯[1,2-d]并恶唑
CAS 号	180186-94-1
分子式	C ₂₁ H ₁₈ N ₂ O ₂
分子量	330.38
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(+)-2, 2'-亚甲基双[(3aR, 8aS)-3a, 8a-二氢-8H-茛苳[1, 2-d]并恶唑] (CAS 号: 180186-94-1) 是一种具有光学活性的杂环化合物, 分子式为 C₂₁H₁₈N₂O₂, 分子量为 330.38。该化合物以(+)-构型存在, 纯度不低于 96%, 其结构中含有茛苳并恶唑骨架和亚甲基桥键, 表现出独特的立体化学特性。该物质通常为白色至类白色固体, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性配体或中间体, 在不对称催化反应中具有重要应用。其刚性结构和特定立体构型使其能够与金属离子 (如铜、钯等) 形成稳定配合物, 从而高效调控反应的立体选择性。在生物化学研究中, 它还可作为探针分子, 用于研究酶活性位点的立体识别机制或开发新型手性药物。

3. 主要应用领域与具体用途

(+)-2, 2'-亚甲基双茛苳并恶唑衍生物广泛应用于以下领域:

- 不对称合成: 作为手性催化剂配体, 参与 C-C 键形成、氢化反应等关键步骤。
- 药物研发: 用于构建手性药物分子骨架, 如抗炎或抗肿瘤活性化合物的合成。
- 材料科学: 作为功能性单体参与高分子材料的制备, 改善材料的光学或机械性能。

4. 储存条件与使用建议

该产品需避光保存于干燥、密闭的容器中, 推荐储存温度为 -20° C 以保持长期稳定性。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。建议以惰性气体 (如氮气) 保护敏感反应体系, 以降低氧化风险。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 ≥ 96%, 并提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 数据以验证结构。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 接触后应立即

用大量清水冲洗。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。具体安全数据可参考提供的材料安全数据表（MSDS）。