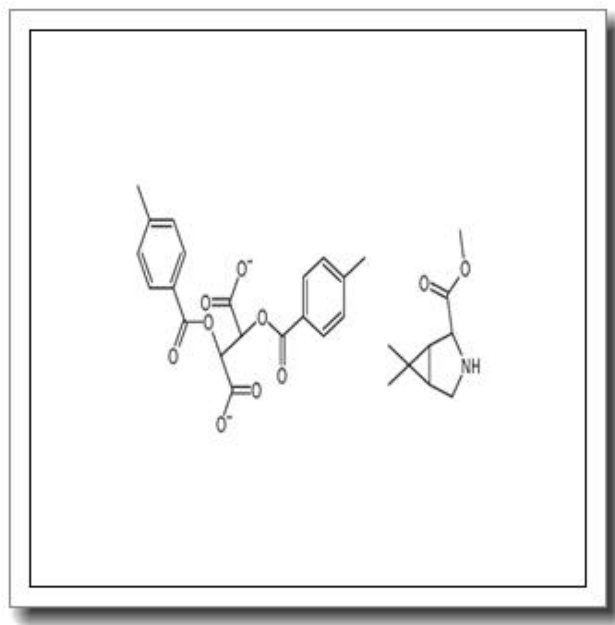


(2S,3S)-2,3-bis[(4-methylbenzoyl)oxy]butanedioate, methyl (1R,2S,5S)-6,6-dimethyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylate

(2S, 3S)-2, 3-bis[(4-methylbenzoyl)oxy]butanedioate, methyl (1R, 2S, 5S)-6, 6-dimethyl-3-azabicyclo[3. 1. 0]hexane-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 3S)-2, 3-bis[(4-methylbenzoyl)oxy]butanedioate, methyl (1R, 2S, 5S)-6, 6-dimethyl-3-azabicyclo[3. 1. 0]hexane-2-carboxylate
中文名称	(2S, 3S)-2, 3-bis[(4-methylbenzoyl)oxy]butanedioate, methyl (1R, 2S, 5S)-6, 6-dimethyl-3-azabicyclo[3. 1. 0]hexane-2-carboxylate
CAS 号	943516-64-1

分子式	C ₂₉ H ₃₁ N ₀ O ₁₀
分子量	553. 557
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(2S, 3S)-2, 3-双[(4-甲基苯甲酰)氧基]丁二酸甲酯与(1R, 2S, 5S)-6, 6-二甲基-3-氮杂双环[3. 1. 0]己烷-2-甲酸甲酯的复合物，CAS 号为 943516-64-1，分子式 C₂₉H₃₁N₀O₁₀，分子量 553. 557。其结构中包含苯甲酰氧基与氮杂双环骨架，赋予其独特的立体选择性和生物活性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过特异性抑制某些酶活性（如丝氨酸蛋白酶或激酶）参与信号转导调控，其双酯结构可增强细胞膜穿透性。氮杂双环部分作为刚性骨架，能精确匹配靶蛋白结合位点，在药物开发中常用于先导化合物优化。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体，广泛应用于以下领域：

- 医药研发：用于合成抗肿瘤、抗炎或神经保护类候选药物，尤其适用于结构修饰以改善药代动力学性质。
- 生化工具：在酶学研究中作为探针分子，揭示底物-酶相互作用机制。
- 材料科学：修饰高分子材料以引入功能性官能团。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装使用，避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解时优先选用无水 DMSO，配制工作液后建议当日使用。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次质检，确保残留溶剂符合 ICH 标准。急性毒性数据（LD₅₀ 大鼠口服）>500 mg/kg，属于刺激性物质，避免接触皮肤或吸入粉尘。废弃物处置需遵守危险化学品规范。MSDS 可应要求提供。