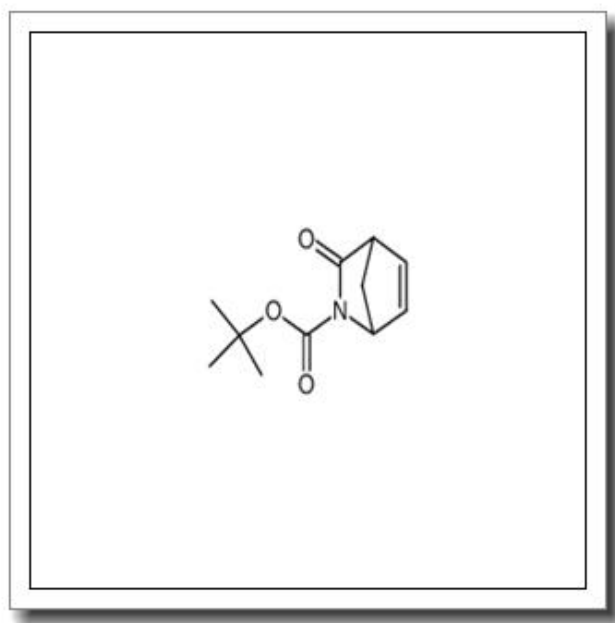


3-oxo-2-aza-bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylic acid tert-butyl ester

3-oxo-2-aza-bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylic acid tert-butyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-oxo-2-aza-bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylic acid tert-butyl ester
中文名称	3-oxo-2-aza-bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylic acid tert-butyl ester
CAS 号	162427-15-8
分子式	C ₁₁ H ₁₅ N ₃ O ₃
分子量	209.242
纯度	≥96%

产品说明

3-oxo-2-aza-bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylic acid tert-butyl ester 产品说明书

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 3-oxo-2-aza-bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylic acid tert-butyl ester，分子式 C₁₁H₁₅N₃O₃，分子量 209.242，CAS 号 162427-15-8。其结构特征为双环[2.2.1]庚烯骨架，含有一个酮基和一个叔丁氧羰基保护的氮杂环，具有显著的立体选择性和反应活性。纯度 ≥96%，可通过 HPLC 和 NMR 验证。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成高价值医药中间体的关键砌块，尤其适用于构建含氮杂环的活性分子。其刚性双环结构可增强目标产物的立体稳定性，而叔丁酯保护基团在后续反应中易于脱除。在蛋白酶抑制剂和抗菌剂研发中，常作为核心骨架用于引入手性中心或药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于药物化学和有机合成领域：

- (1) 作为抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）的中间体；
- (2) 用于构建 β-内酰胺类抗生素的类似物；
- (3) 在不对称催化反应中作为手性模板；
- (4) 参与环加成反应制备复杂多环化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C 至 4° C 的干燥环境中，避光密封保存。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时需在干燥惰性气体环境下操作，避免接触强氧化剂或酸碱。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性差。

5. 质量控制与安全信息

通过 GC-MS 和元素分析确保批次一致性，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：

- (1) 穿戴防护手套和护目镜;
- (2) 避免吸入粉尘, 操作时使用通风橱;
- (3) 如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗;
- (4) 废弃物需按危险化学品规范处置。

本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验。