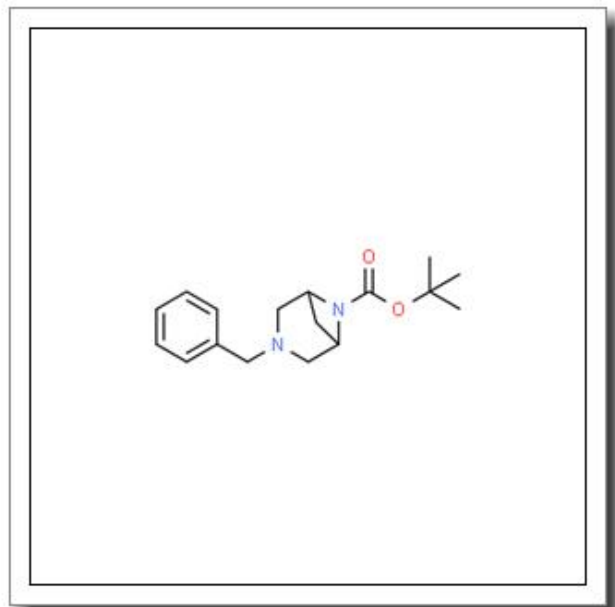


3-苄基-3,6-二氮杂双环[3.1.1]庚烷-6-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 3-benzyl-3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 3-benzyl-3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-6-carboxylate
中文名称	3-苄基-3,6-二氮杂双环[3.1.1]庚烷-6-羧酸叔丁酯
CAS 号	869494-15-5
分子式	C ₁₇ H ₂₄ N ₂ O ₂
分子量	288.38466
纯度	≥96%

产品说明

3-苄基-3,6-二氮杂双环[3.1.1]庚烷-6-羧酸叔丁酯产品说明书

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 tert-Butyl 3-benzyl-3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-6-carboxylate, CAS 号 869494-15-5, 分子式 C₁₇H₂₄N₂O₂, 分子量 288.38。其结构包含双环庚烷骨架与苄基、叔丁氧羰基保护基团，具有刚性环系和手性中心，纯度 ≥96% (HPLC)。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为双环胺类衍生物，该分子是药物化学中重要的中间体，其结构特征可调节生物活性分子的脂溶性与空间构型。叔丁氧羰基 (Boc) 保护基赋予其良好的反应选择性，适用于多肽合成及杂环化合物的构建。在神经递质类似物开发中，双环骨架可模拟天然配体的构象，潜在应用于 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 靶向药物设计。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：医药研发中作为激酶抑制剂或抗菌剂的合成前体；有机合成中用于构建含氮杂环体系；材料科学中作为功能化聚合物的单体。典型反应包括 Boc 脱保护后的胺基衍生化、钯催化偶联反应等。具体案例包括阿尔茨海默病靶向分子库的构建及抗菌喹诺酮类衍生物的修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充氮保护以延长稳定性。使用前需恢复至室温并检测水分含量 (建议 ≤0.5%)。反应体系中建议搭配无水溶剂 (如经分子筛处理的 THF)，并严格控制碱性条件以防止 Boc 基团水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱验证，符合 ACS 级标准。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物

应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。安全数据表（SDS）编号 PS-869494-15-5 可向供应商索取。

注：本说明基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。产品规格可能因批次调整，请以随货质检报告为准。