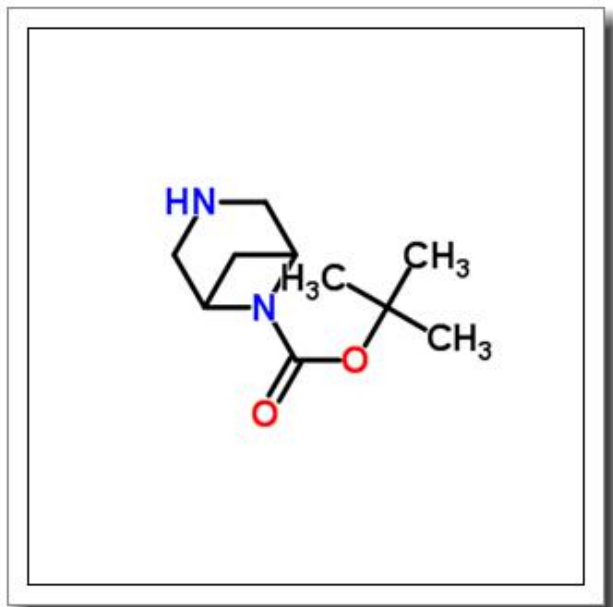


3,6-二氮杂双环[3.1.1]庚烷-6-羧酸叔丁酯

tert-butyl 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-6-carboxylate
中文名称	3,6-二氮杂双环[3.1.1]庚烷-6-羧酸叔丁酯
CAS 号	869494-16-6
分子式	C ₁₀ H ₁₈ N ₂ O ₂
分子量	198.262
纯度	≥96%

产品说明

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 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptane-6-carboxylate, CAS 号 869494-16-6, 分子式 C₁₀H₁₈N₂O₂, 分子量 198.262。其结构包含双环[3.1.1]庚烷骨架和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团，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，该分子具有刚性结构和特定空间取向，可作为药物化学中的关键中间体。Boc 保护基的引入增强了其稳定性，便于后续脱保护合成活性胺类化合物。其在调节分子构象和增强靶标结合特异性方面具有重要作用，尤其适用于神经递质类似物或酶抑制剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域，主要用于以下方向：一是作为中枢神经系统药物（如 5-HT 受体调节剂）的合成前体；二是用于构建小分子抑制剂的核心骨架，如激酶或蛋白酶抑制剂；三是在材料科学中作为功能性单体。具体实验中可用于固相合成、组合化学库构建及结构-活性关系 (SAR) 研究。

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。开封后需充惰性气体保护，并于 24 个月内使用。实验操作应在通风橱中进行，使用无水溶剂以确保反应效率。建议通过薄层色谱 (TLC) 或质谱 (MS) 监测反应进程。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱严格质检，符合国际化学品标准。安全数据表明，其急性毒性较低 (LD₅₀ 未明确)，但仍需避免吸入或皮肤直接接触。操作时需佩戴护

目镜、防尘口罩及丁腈手套。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有机有害物质处理，遵守当地环保法规。

注：本说明仅限专业研究人员参考，具体应用需结合实验方案调整。