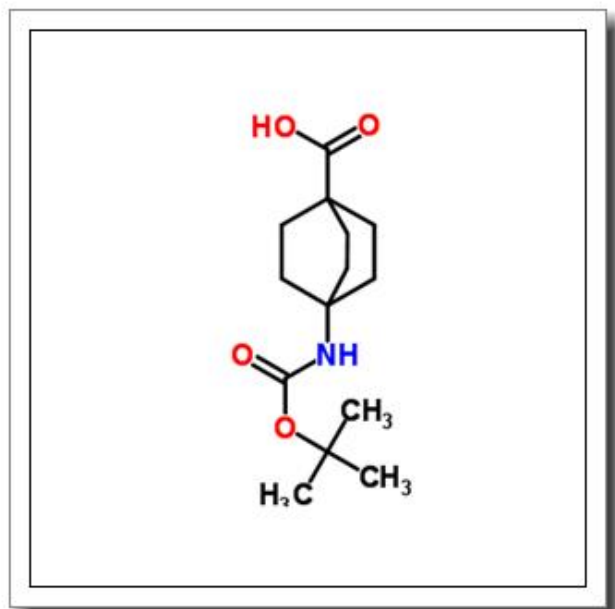


4-((叔丁氧基羰基)氨基)双环[2.2.2]辛烷-1-羧酸

4-((tert-Butoxycarbonyl)amino)bicyclo[2.2.2]octane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-((tert-Butoxycarbonyl)amino)bicyclo[2.2.2]octane-1-carboxylic acid
中文名称	4-((叔丁氧基羰基)氨基)双环[2.2.2]辛烷-1-羧酸
CAS 号	863304-76-1
分子式	C ₁₄ H ₂₃ N ₁ O ₄
分子量	269.337
纯度	≥96%

产品说明

4-((叔丁氧基羰基)氨基)双环[2.2.2]辛烷-1-羧酸 (CAS 号: 863304-76-1) 是一种具有特定结构的有机化合物, 其分子式为 $C_{14}H_{23}NO_4$, 分子量为 269.337。该化合物以白色或类白色固体形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构中的叔丁氧基羰基 (Boc) 保护基和双环[2.2.2]辛烷骨架赋予其独特的化学稳定性和空间位阻效应, 适用于多种有机合成和生物化学应用。

1. 产品概述与化学特性

该化合物是一种重要的中间体, 常用于肽类化合物和药物分子的合成。其双环结构提供了刚性骨架, 有助于稳定分子构象, 而 Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除, 便于后续官能团修饰。其羧酸基团可进一步衍生为酯、酰胺或其他活性形式, 扩展了其在合成化学中的应用范围。

2. 生物化学功能与重要性

在生物化学领域, 该化合物常用于构建具有特定三维结构的分子探针或药物候选物。其双环结构可模拟天然产物的刚性特征, 用于研究蛋白质-配体相互作用或酶抑制机制。Boc 保护基的引入有助于在复杂合成中避免副反应, 提高目标产物的收率。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为肽类药物的合成中间体, 用于构建非天然氨基酸衍生物。
- 在药物化学中用于设计酶抑制剂或受体调节剂, 尤其适用于中枢神经系统药物开发。
- 作为手性辅助试剂或催化剂配体, 参与不对称合成反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需置于干燥惰性气体环境中。使用前需恢复至室温并避免吸湿。溶解时可选用二甲基亚砜 (DMSO) 或二氯甲烷等有机溶剂, 操

作应在通风橱中进行。Boc 基团的脱保护通常需使用三氟乙酸 (TFA) 或盐酸/乙酸乙酯体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$ ，并提供完整的质谱和核磁共振分析数据。安全信息方面，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家有机化学品处置规范处理，避免直接排放至环境中。