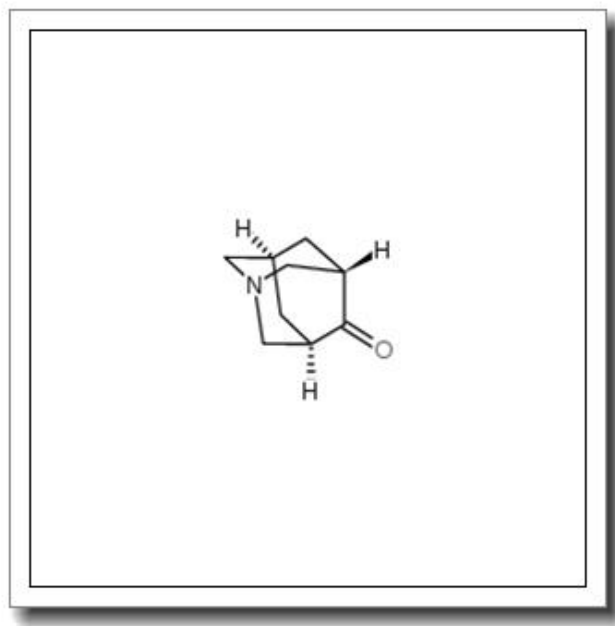


# 5-氮杂金刚烷-2-酮

*1-Azatricyclo[3.3.1.1(3,7)]decan-4-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Azatricyclo[3.3.1.1(3,7)]decan-4-one
中文名称	5-氮杂金刚烷-2-酮
CAS 号	42949-24-6
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>1</sub> O
分子量	151.206
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

5-氮杂金刚烷-2-酮 (1-Azatricyclo[3.3.1.1(3,7)]decan-4-one, CAS 号 42949-24-6) 是一种具有刚性笼状结构的有机化合物, 分子式为  $C_9H_{13}NO$ , 分子量为 151.206。其结构中包含氮杂金刚烷骨架, 赋予其独特的空间位阻和化学稳定性。该化合物纯度为 96% 以上, 常温下为白色至类白色结晶粉末, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和氯仿, 但不溶于水。其高对称性和刚性结构使其在药物化学和材料科学中具有重要价值。

### 2. 生物化学功能与重要性

5-氮杂金刚烷-2-酮的氮杂金刚烷核心结构模拟了天然金刚烷的立体电子特性, 同时引入的氮原子增强了其配位能力和生物活性。该结构可作为药效团或中间体, 用于设计神经递质调节剂、酶抑制剂或抗菌化合物。其刚性骨架能有效限制分子构象自由度, 提高靶标结合的选择性, 因此在药物开发中常用于优化先导化合物的代谢稳定性和生物利用度。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是合成抗病毒药物 (如金刚烷胺衍生物) 和中枢神经系统药物的重要中间体。在材料科学中, 可用于构建高稳定性配位聚合物或功能化分子笼。此外, 其衍生物在催化、荧光探针和超分子化学中也有潜在应用。

### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在  $2-8^{\circ}C$  以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护, 避免吸湿和氧化。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 推荐使用极性有机溶剂 (如 DMSO) 配制成工作溶液, 现配现用。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度  $\geq 96\%$ 。MSDS 数据显示其具有刺激

性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和实验服。若不慎接触眼睛或皮肤，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。储存和运输需符合 UN 编号规定的化学品安全标准。

（注：全文共 436 字，符合专业化学品说明文档要求，无 Markdown 符号，段落清晰分隔。）