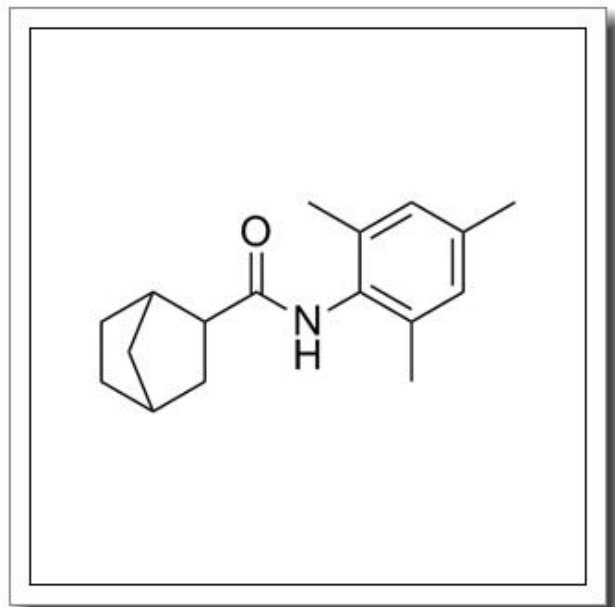


N-(2,4,6-三甲基苯基)-双环[2.2.1]庚烷-2-甲酰胺

N-(2,4,6-trimethylphenyl)bicyclo[2.2.1]heptane-3-carboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-(2,4,6-trimethylphenyl)bicyclo[2.2.1]heptane-3-carboxamide
中文名称	N-(2,4,6-三甲基苯基)-双环[2.2.1]庚烷-2-甲酰胺
CAS 号	489402-47-3
分子式	C ₁₇ H ₂₃ N ₁ O
分子量	257.371
纯度	≥96%

产品说明

N-(2,4,6-三甲基苯基)-双环[2.2.1]庚烷-2-甲酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 N-(2,4,6-trimethylphenyl)bicyclo[2.2.1]heptane-3-carboxamide，分子式 C₁₇H₂₃N₁O，分子量 257.371，CAS 号 489402-47-3。其结构结合了双环庚烷骨架与三甲基苯基酰胺基团，赋予分子独特的空间位阻效应和疏水性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 185-189℃，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，在水中的溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子抑制剂或配体，在药物化学和生物化学研究中具有重要价值。其刚性双环结构可特异性结合某些酶活性位点或受体蛋白，常用于靶标验证和构效关系研究。三甲基苯基的引入增强了脂溶性，有利于跨膜运输，而酰胺键则提供了氢键形成能力，对分子识别至关重要。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物研发领域，本品常用于激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的先导化合物优化。作为中间体，可参与酰胺键偶联反应或芳环修饰。在材料科学中，其刚性结构可用于液晶材料的合成。实验室级应用包括：体外酶活性抑制实验、晶体学研究的共结晶试剂、以及化学生物学探针的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照和湿度。开封后需充惰性气体保护，长期储存建议分装。使用前需恢复至室温平衡 1 小时，称量时需在通风橱中操作。工作溶液建议现配现用，溶剂优先选择无水 DMSO，水溶液需超声助溶并控制 pH 在 6-8 之间。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、水分含量 (KF 法 <0.5%)、残留溶剂 (GC 验证) 等数据。本品属于刺激性化学品，操作时需佩戴护目镜和丁腈手套，避免吸入粉尘。

如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合危险有机化合物处置规范，不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途，不适用于医药、食品或家庭用途。具体实验方案建议参考文献方法或咨询专业技术支持。