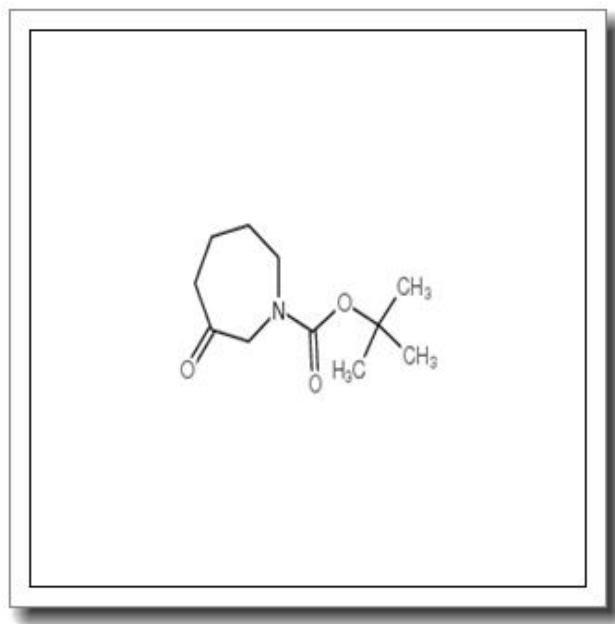


N-Boc-3-氮杂环庚酮

N-Boc-3-azacycloheptan-1-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-Boc-3-azacycloheptan-1-one
中文名称	N-Boc-3-氮杂环庚酮
CAS 号	870842-23-2
分子式	C ₁₁ H ₁₉ N ₃ O ₃
分子量	213.273
纯度	≥ 96%

产品说明

N-Boc-3-氮杂环庚酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

N-Boc-3-氮杂环庚酮（化学名称：N-Boc-3-azacycloheptan-1-one，CAS 号：870842-23-2）是一种重要的氮杂环庚烷衍生物，分子式为 C₁₁H₁₉N₃O₃，分子量为 213.273。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度 ≥96%，具有 Boc（叔丁氧羰基）保护基团，显著提高了其在有机合成中的稳定性和反应选择性。其结构中的七元氮杂环与酮基官能团使其成为构建复杂杂环化合物的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为保护基化学的典型代表，Boc 基团可在酸性条件下高效脱除，而氮杂环庚酮骨架常见于生物活性分子中，如药物先导化合物和天然产物。该产品在肽类合成、酶抑制剂设计及药物修饰中具有重要作用，尤其适用于需要温和反应条件的多步合成路线。其分子结构的刚性特征还可用于研究构效关系，助力新药研发。

3. 主要应用领域与具体用途

N-Boc-3-氮杂环庚酮广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括：作为抗肿瘤、抗病毒药物合成的中间体；用于构建神经递质类似物或 GPCR（G 蛋白偶联受体）调节剂；在材料科学中参与制备功能性高分子单体。实验室中常通过其酮基进行还原胺化或格氏反应，进一步衍生化。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存，长期储存需充入惰性气体（如氮气）。开封后应密封防潮，避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛（如氩气）下操作，若用于酸性条件反应，需提前规划 Boc 脱保护步骤。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，MS 和 NMR 谱图验证结构。操作时需佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中进行，避免吸入粉尘或接触皮肤。安全数据表（SDS）

显示其可能导致眼睛和皮肤刺激，若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

注：本说明基于现有实验数据编写，具体应用需结合用户工艺验证。产品规格可能因批次调整，请以随货质检报告为准。