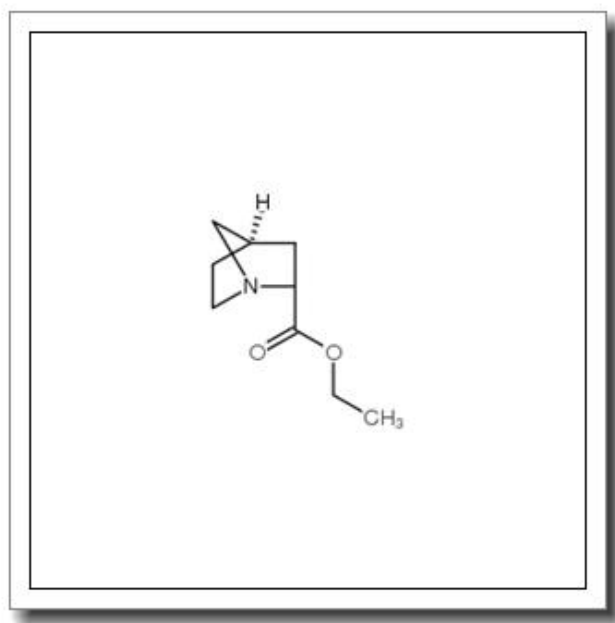


ethyl 1-azabicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylate

ethyl 1-azabicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 1-azabicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylate
中文名称	ethyl 1-azabicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylate
CAS 号	646055-79-0
分子式	C ₉ H ₁₅ N ₂ O ₂
分子量	169.221
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

ethyl 1-azabicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylate (CAS 号: 646055-79-0) 是一种具有双环结构的含氮杂环化合物, 分子式为 C₉H₁₅N₂O₂, 分子量为 169.221。其化学结构包含一个七元双环体系 (1-氮杂双环[2.2.1]庚烷) 和一个酯基 (乙酯), 赋予其独特的空间位阻和反应活性。该化合物纯度为 96% 以上, 通常表现为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 易溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和乙腈。

2. 生物化学功能与重要性

作为双环胺类衍生物, 该化合物在生物化学研究中表现出显著的配体特性, 尤其可作为手性合成子或中间体用于构建复杂分子骨架。其刚性双环结构能够模拟天然生物碱的构象, 因此在药物化学中常用于靶向神经递质受体或酶抑制剂的开发。此外, 酯基的存在使其易于通过水解或转酯化反应进一步功能化。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中, 它是合成镇痛剂、抗胆碱能药物或中枢神经系统调节剂的关键中间体。在不对称催化领域, 其结构可用于设计手性催化剂或配体。具体实验用途包括: 1) 作为模板分子用于构效关系研究; 2) 参与多步合成中的环化或官能团转化反应; 3) 用于放射性标记前体的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氩气) 保护下密封保存, 长期储存温度应低于 -20°C, 短期使用可置于 2-8°C 冷藏。开封后需避免吸湿, 建议分装使用。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。溶解时优先选用干燥的极性溶剂, 若出现结晶现象可轻微加热至 40°C 以下助溶。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $\geq 96\%$, 批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 数据可用于进一步验证结构。安全数据表明, 该化合物对眼

睛和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴护目镜和防毒面具。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险有机废物处理，禁止直接排放至下水道。

(全文共计 436 字)