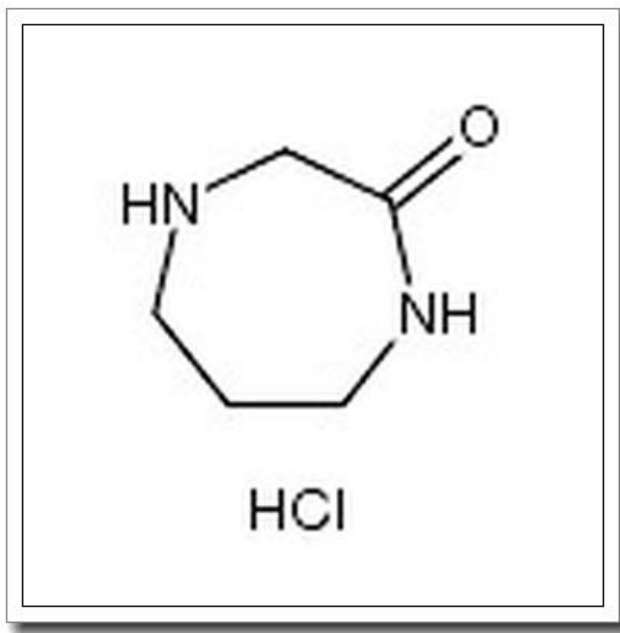


1,4-二氮杂环庚烷-2-酮盐酸盐

2H- 1, 4- Diazepin- 2- one, hexahydro- , hydrochloride (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	2H- 1, 4- Diazepin- 2- one, hexahydro- , hydrochloride (1:1)
中文名称	1,4-二氮杂环庚烷-2-酮盐酸盐
CAS 号	1056010-05-9
分子式	C ₅ H ₁₁ C ₁ N ₂ O
分子量	150.607
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 2H-1,4-二氮杂环庚烷-2-酮盐酸盐 (1,4-Diazepan-2-one hydrochloride)，化学式为 $C_5H_{11}ClN_2O$ ，分子量 150.607，CAS 号 1056010-05-9。其结构为六元环状酰胺衍生物，以盐酸盐形式存在，纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，易溶于水及极性有机溶剂，具有典型酰胺键的红外特征吸收峰（约 1650 cm^{-1} ）和盐酸盐的离子特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为二氮杂环庚烷类化合物，其结构核心兼具酰胺与仲胺活性位点，可参与氢键形成和质子化反应。在生物体系中，此类结构常作为药效团或中间体，用于调节神经递质受体（如 GABA 类似物）或酶活性。其刚性环状结构有助于提高代谢稳定性，在药物设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发领域：

- (1) 作为中枢神经系统药物（如抗焦虑、镇静类药物）的关键中间体；
- (2) 用于构建杂环化合物库，通过结构修饰开发新型蛋白酶抑制剂；
- (3) 在生化研究中作为模型分子，探究酰胺类化合物的构效关系。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于干燥、避光环境中，推荐温度 $2-8^{\circ}\text{C}$ ，长期储存建议充氮保护。使用时需在干燥惰性气体环境下操作，避免吸湿。水溶液需现配现用，pH 值应调节至中性范围（6.0-8.0）以维持稳定性。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 测定纯度，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。本品对眼睛和呼吸道有轻微刺激性，操作时应佩戴防护手套及护目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注: 以上说明基于实验室级产品, 用于研发用途。实际应用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并验证适用性。)