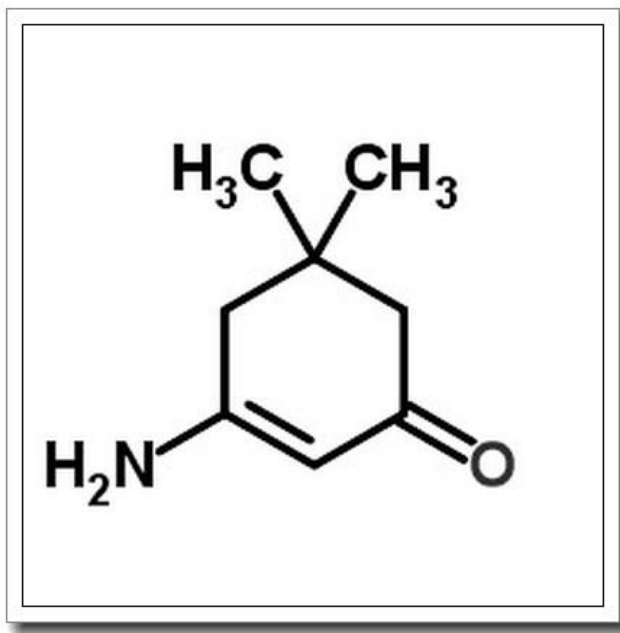


3-氨基-5,5-二甲基-2-环己烯-1-酮

3-Amino-5,5-dimethyl-2-cyclohexen-1-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Amino-5,5-dimethyl-2-cyclohexen-1-one
中文名称	3-氨基-5,5-二甲基-2-环己烯-1-酮
CAS 号	873-95-0
分子式	C ₈ H ₁₃ N ₁ O
分子量	139.195
纯度	>96%

产品说明

3-氨基-5,5-二甲基-2-环己烯-1-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氨基-5,5-二甲基-2-环己烯-1-酮 (CAS 号: 873-95-0) 是一种具有环己烯酮骨架的氨基衍生物, 分子式为 $C_8H_{13}NO$, 分子量 139.195。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的烯酮类化合物的反应活性, 如亲核加成和缩合反应。其结构中 5,5-二甲基取代基增强了空间位阻效应, 而 3 位氨基赋予其两性特性, 可在酸性或碱性条件下形成相应的盐类。

2. 生物化学功能与重要性

作为环己烯酮类化合物的关键中间体, 该物质在生物碱合成中扮演重要角色。其氨基和烯酮官能团可作为多官能团化修饰位点, 参与构建杂环骨架或作为手性合成子。在酶抑制研究中, 类似结构的衍生物已被证实具有调控某些脱氢酶活性的潜力, 因此在药物先导化合物开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 有机合成: 用于构建药物分子中的环己烯并吡啶、喹啉等杂环结构, 尤其在抗炎和抗菌类化合物合成中常见。
- 材料科学: 作为功能化聚合物的单体或交联剂, 可改善材料的光稳定性。
- 农业化学: 某些衍生物可作为植物生长调节剂的合成前体。
- 分析试剂: 在色谱分析中用作衍生化试剂, 增强检测灵敏度。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光保存于 $2-8^{\circ}C$ 干燥环境, 避免与强氧化剂、酸酐类物质共存。使用时需在通风橱中操作, 建议佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该产品易溶于甲醇、乙醇等极性有机溶剂, 微溶于水 (约 1.2 g/L , $25^{\circ}C$), 可根据实验需求选择适当溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度，批号关联的 COA 可提供详细质检数据。安全数据表明，其急性毒性（LD50 大鼠经口）为 1200 mg/kg，属于低毒类物质，但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。意外接触时，应立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，建议采用焚烧法处理。

（注：实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS）