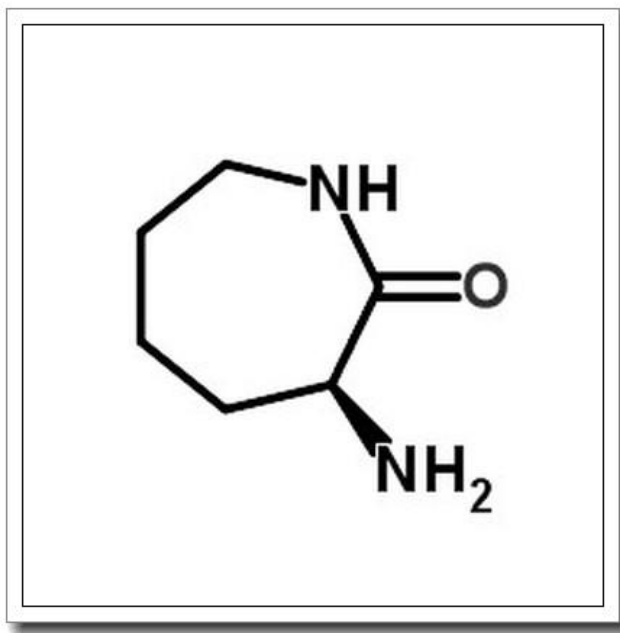


# 3-氨基六氢-2H-氮杂卓-2-酮盐酸盐

*(3S)-3-aminoazepan-2-one, hydrochloride*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | (3S)-3-aminoazepan-2-one, hydrochloride         |
| 中文名称  | 3-氨基六氢-2H-氮杂卓-2-酮盐酸盐                            |
| CAS 号 | 26081-07-2                                      |
| 分子式   | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O |
| 分子量   | 128.172   |
| 纯度    | >96%  |

## 产品说明

### 3-氨基六氢-2H-氮杂卓-2-酮盐酸盐产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为(3S)-3-aminoazepan-2-one, hydrochloride, CAS 号为 26081-07-2, 分子式 C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O, 分子量 128.172, 是一种白色至类白色结晶性粉末。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 测定大于 96%, 具有明确的立体构型 (3S)。该化合物属于七元环内酰胺衍生物, 盐酸盐形式增强了其水溶性和稳定性, 适合生物化学研究应用。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为氮杂卓类化合物的关键中间体, 3-氨基六氢-2H-氮杂卓-2-酮盐酸盐在酶抑制机制和药物分子设计中具有重要作用。其结构中的氨基和羰基可作为氢键供体或受体, 参与蛋白质相互作用, 尤其适用于蛋白酶抑制剂和神经递质类似物的合成研究。该分子在构效关系研究中常用于优化药效团的空间排列。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 1) 作为合成抗抑郁药物和镇痛剂的关键中间体; 2) 用于构建多肽模拟物, 研究酶底物特异性; 3) 在金属配合物催化反应中作为手性配体前体。此外, 其在神经科学领域可用于  $\gamma$ -氨基丁酸 (GABA) 受体调节剂的开发。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、干燥避光条件下密封保存, 长期储存需充入惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免反复冻融。溶解推荐使用去离子水或缓冲盐溶液 (pH 4-6), 若出现轻微结块可通过 37° C 水浴短暂震荡溶解。工作液建议现配现用, 剩余溶液需在-80° C 分装保存。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构, 重金属含量低于 10ppm。操作时需佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触, 立即用大量清

水冲洗并就医。安全数据表 (SDS) 显示其急性毒性为 LD50 320mg/kg (大鼠经口), 属于有害物质, 废弃物处置需符合危险化学品管理规范。

本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。使用者应具备专业化学实验技能, 并遵守所在机构的生物安全准则。