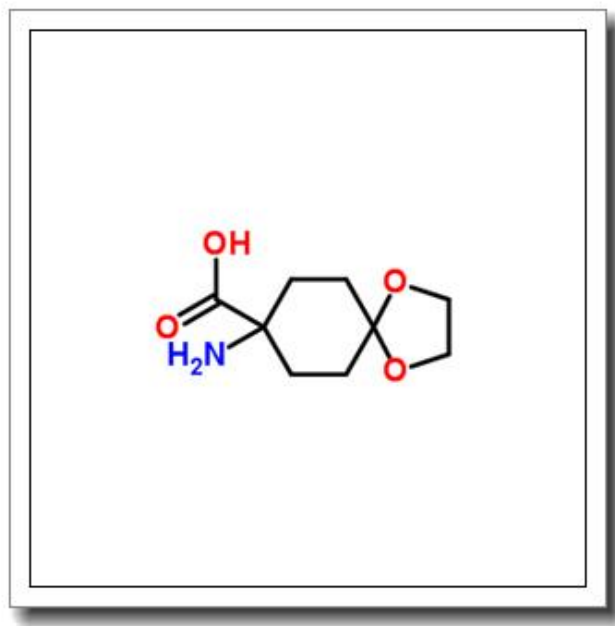


1-氨基-4-恶环己烷羧酸乙烯

1-amino-4-oxocyclohexanecarboxylic acid ethylene ketal



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-amino-4-oxocyclohexanecarboxylic acid ethylene ketal
中文名称	1-氨基-4-恶环己烷羧酸乙烯
CAS 号	54621-18-0
分子式	C ₉ H ₁₅ N ₀ O ₄
分子量	201.22
纯度	≥96%

产品说明

1-氨基-4-恶环己烷羧酸乙烯酮缩二醇产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-amino-4-oxocyclohexanecarboxylic acid ethylene ketal (CAS 54621-18-0)，分子式 C₉H₁₅N₀₄，分子量 201.22，是一种白色至类白色结晶粉末。其结构同时包含氨基、酮缩二醇和羧酸官能团，赋予其独特的反应活性。纯度标准 ≥96% (HPLC 测定)，在极性有机溶剂中表现良好溶解性，但在水中溶解度较低。该化合物对光敏感，需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为环己烷衍生物，其酮缩二醇结构可保护羰基在酸性条件下稳定存在，而氨基和羧酸基团使其成为重要的手性合成砌块。在生物体系中，该结构类似物可模拟天然代谢物构象，常用于酶抑制剂设计和药物分子修饰。其刚性环状骨架对空间位阻的调控具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于三个领域：

- 3.1 医药中间体：用于合成神经调节剂和抗炎药物的关键前体
- 3.2 不对称催化：作为手性助剂参与立体选择性合成
- 3.3 材料科学：改性高分子材料的交联剂组分

典型实验包括：

- 通过脱保护反应制备活性醛基化合物
- 与酰氯试剂缩合构建肽类似物
- 金属催化下的不对称氢化反应

4. 储存条件与使用建议

储存条件：

- 温度：-20℃长期保存，4℃短期使用
- 环境：充氮气密封，避光防潮

使用建议:

- 解冻后需平衡至室温再开瓶
- 建议在通风橱中操作
- 反应体系中需严格控制水分含量 (<0.1%)

5. 质量控制与安全信息

质量控制:

- 批次检测包括 HPLC 纯度、熔点 (标准范围 158-161°C) 和旋光度
- 提供 COA (分析证书) 及 NMR/HRMS 结构确证数据

安全信息:

- 危险代码: Xi (刺激性)
- 个人防护: 佩戴护目镜和丁腈手套
- 应急处理: 皮肤接触时用大量清水冲洗 15 分钟
- 符合 REACH 法规注册要求

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献确认反应条件。