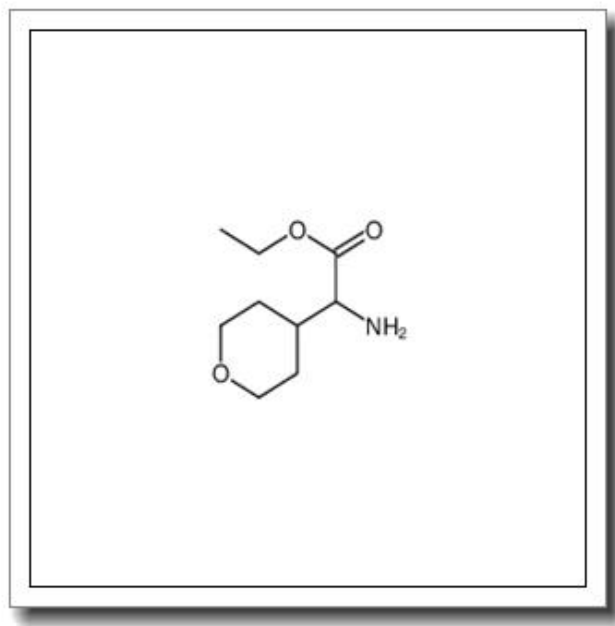


2-氨基-2-(噁烷-4-基)乙酸乙酯

ethyl 2-amino-2-(oxan-4-yl)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 2-amino-2-(oxan-4-yl)acetate
中文名称	2-氨基-2-(噁烷-4-基)乙酸乙酯
CAS 号	646055-93-8
分子式	C ₉ H ₁₇ N ₃ O ₃
分子量	187.236
纯度	≥ 96%

产品说明

2-氨基-2-(噁烷-4-基)乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 ethyl 2-amino-2-(oxan-4-yl)acetate，分子式 C₉H₁₇N₃O₃，分子量 187.236，CAS 号 646055-93-8。其结构中同时含有氨基和酯基官能团，以及四氢吡喃环（噁烷基），赋予其独特的极性和反应活性。纯度 ≥96%（HPLC 测定），易溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成手性氨基酸衍生物的关键中间体，其噁烷环结构可增强分子刚性，广泛应用于药物分子设计中。氨基与酯基的共存使其既能参与酰胺缩合反应，又可作为亲核试剂，在构建 β-内酰胺类抗生素或神经递质类似物中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

医药领域：用于制备抗感染药物（如碳青霉烯类抗生素）和中枢神经系统药物前体。

有机合成：作为不对称合成的手性砌块，催化氢化反应中构建 α-氨基酸结构。

材料科学：改性高分子材料时引入功能性氨基团。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于干燥、避光、-20℃环境下，惰性气体保护可延长稳定性。使用前需恢复至室温并真空干燥。建议在通风橱中操作，避免与强氧化剂、酸碱直接接触。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF 溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质检，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：LD₅₀（大鼠经口）>2000 mg/kg，但可能引起眼睛和皮肤刺激。操作时需佩戴护目镜、丁腈手套，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物按危险化学品规范处置。

(注: 本说明基于现有实验数据编制, 具体应用需结合用户工艺验证。技术参数更新恕不另行通知。)