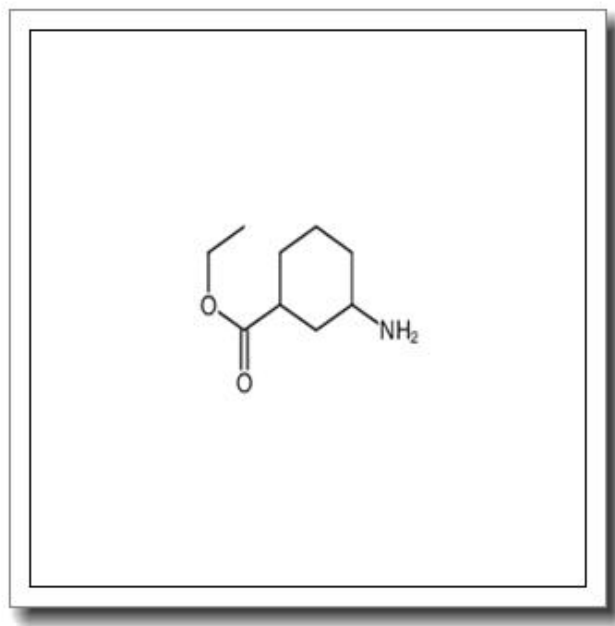


3-氨基环己烷羧酸乙酯

Ethyl 3-aminocyclohexanecarboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | Ethyl 3-aminocyclohexanecarboxylate |
| 中文名称 | 3-氨基环己烷羧酸乙酯 |
| CAS 号 | 53084-60-9 |
| 分子式 | C ₉ H ₁₇ N ₂ O ₂ |
| 分子量 | 171.237 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

3-氨基环己烷羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氨基环己烷羧酸乙酯 (Ethyl 3-aminocyclohexanecarboxylate, CAS 号 53084-60-9) 是一种环状氨基酯类化合物, 分子式为 $C_9H_{17}NO_2$, 分子量 171.237。本品为无色至淡黄色透明液体, 具有典型的酯类气味, 纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中同时包含氨基和酯基官能团, 使其兼具亲核性和水解敏感性, 在极性有机溶剂 (如乙醇、甲醇、乙腈) 中易溶, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性合成子, 在有机合成中具有重要价值。氨基的碱性使其可作为亲核试剂参与缩合反应, 而酯基则可通过水解或转酯化反应进一步衍生化。其环己烷骨架赋予分子一定的立体刚性, 在构建药物中间体时有助于控制立体构型。此外, 其结构特征与某些神经递质类似物相关, 因此在药物研发领域备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氨基环己烷羧酸乙酯广泛应用于医药和精细化工领域。在药物合成中, 它是制备抗抑郁剂、局部麻醉剂及镇痛类药物 (如某些哌啶类衍生物) 的关键中间体。在材料科学中, 可用于合成功能性聚合物单体。实验室中常作为不对称催化反应的底物或手性助剂使用。具体应用案例包括: 卡巴拉汀类似物的合成、环状 β -氨基酸衍生物的制备等。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于密闭容器中, 置于阴凉干燥处 ($2-8^{\circ}C$ 为佳), 避免光照和潮湿环境。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护以延长保存期。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。因其可能对呼吸道和皮肤产生刺激性, 避免直接接触。若需长期保存, 建议定期检测纯度 (通过 HPLC 或 GC 分析)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过核磁共振 (1H NMR) 和质谱 (MS) 进行结构确证, 纯度由气相色谱

(GC) 或高效液相色谱 (HPLC) 测定。安全数据表明, 其急性毒性类别为 LD50 (大鼠经口) >2000 mg/kg, 但仍需按有害化学品处理。废弃处置应遵守当地环保法规, 不可直接排入下水道。运输时需贴“刺激性物质”标签, UN 编号建议参考 UN1993 (易燃液体, 未另作规定的)。

注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件调整。建议使用者查阅最新版 Material Safety Data Sheet (MSDS) 获取完整安全信息。