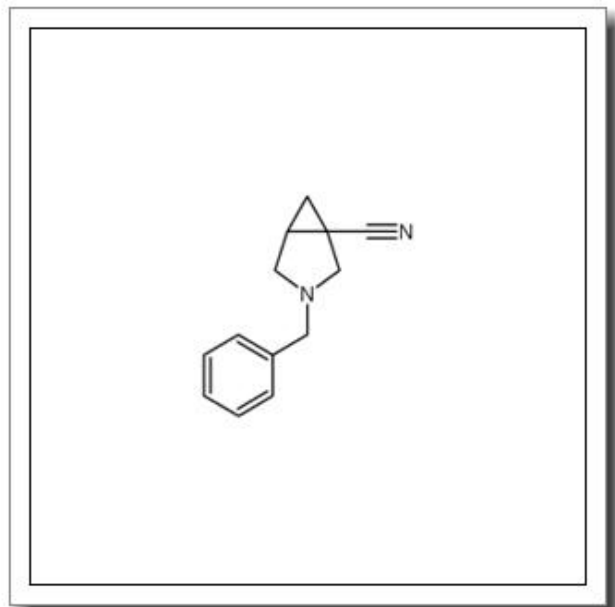


# 3-(苯甲基)-3-阿杂环[3.1.0]H 己烷-1-甲 醛

*3-benzyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-1-carbonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-benzyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-1-carbonitrile
中文名称	3-(苯甲基)-3-阿杂环[3.1.0]H 己烷-1-甲 醛
CAS 号	56062-59-0
分子式	C13H14N2
分子量	198.264
纯度	≥96%

## 产品说明

### 3-苄基-3-氮杂双环[3.1.0]己烷-1-甲腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-苄基-3-氮杂双环[3.1.0]己烷-1-甲腈（3-benzyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-1-carbonitrile），CAS 号 56062-59-0，分子式 C<sub>13</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>，分子量 198.264。其结构特征为刚性双环体系与苄基取代基的结合，赋予分子独特的三维空间构型。纯度标准 ≥96%（HPLC），常见杂质为同分异构体及合成中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为双环胺类衍生物，其分子中的氰基和氮杂双环结构可作为药效团，与多种生物靶点（如神经递质受体或酶活性位点）产生特异性相互作用。在药物化学中，此类结构常被用于调节分子脂溶性与刚性，优化药物代谢动力学特性。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，具体包括：

- 3.1 中枢神经系统药物先导化合物开发，尤其针对 GABA 受体或单胺转运体的调节剂设计。
- 3.2 作为有机合成中间体，用于构建复杂杂环体系，例如通过氰基转化制备羧酸衍生物或酰胺类化合物。
- 3.3 在不对称催化研究中作为手性配体的结构模块。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光保存于 -20° C 至 4° C 干燥环境。长期储存建议充氮保护。使用时需在惰性或惰性气体环境下操作（如氩气手套箱），避免吸湿及氧化。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂，水溶性较低（<0.1 mg/mL）。

#### 5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度分析、LC-MS 分子量确认及 <sup>1</sup>H NMR 结构验证。安全数据表明该物质对眼睛和呼吸道有刺激性（GHS 分类：H315-H319-H335），操作时应

佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。废弃物需按危险化学品规范处置。急救措施：  
吸入时转移至空气新鲜处，皮肤接触后立即用肥皂水冲洗 15 分钟。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）