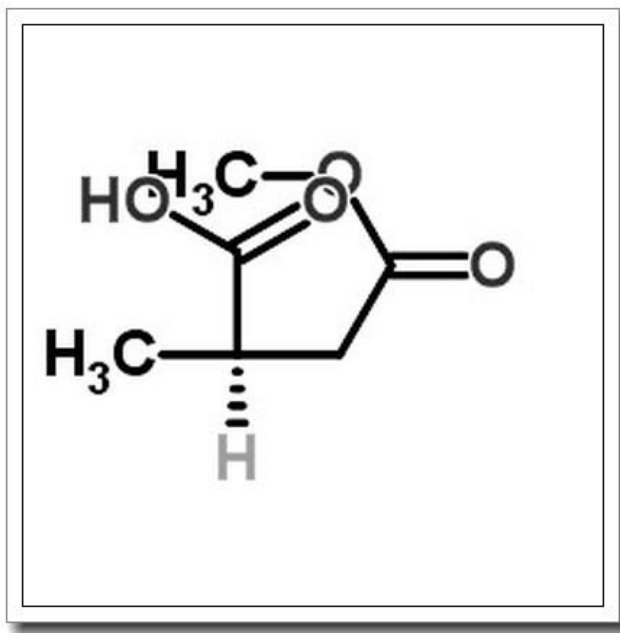


(R)-(+)-3-甲基琥珀酸单甲酯

(R)-4-Methoxy-2-methyl-4-oxobutanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-4-Methoxy-2-methyl-4-oxobutanoic acid
中文名称	(R)-(+)-3-甲基琥珀酸单甲酯
CAS 号	81025-83-4
分子式	C ₆ H ₁₀ O ₄
分子量	146.141
纯度	>96%

产品说明

(R)-4-甲氧基-2-甲基-4-氧代丁酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 (R)-4-甲氧基-2-甲基-4-氧代丁酸, 中文别名 (R)-(+)-3-甲基琥珀酸单甲酯, CAS 号 81025-83-4, 分子式 $C_6H_{10}O_4$, 分子量 146.141。其为无色至淡黄色透明液体或低熔点固体, 具有光学活性 (R 构型), 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物属于手性羧酸衍生物, 结构中含甲氧羰基和甲基取代基, 易溶于多数有机溶剂 (如甲醇、乙醇、DMSO), 在水中的溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性合成砌块, (R)-构型在不对称合成中具有关键作用。其羧基和酯基可参与缩合、酯交换等反应, 甲基取代位点提供空间位阻效应, 常用于构建复杂手性分子骨架。在生物体内代谢研究中, 该结构类似琥珀酸衍生物, 可能参与三羧酸循环相关路径的调控或作为酶抑制剂前体。

3. 主要应用领域与具体用途

医药领域: 用于合成手性药物中间体, 特别是抗炎、抗肿瘤及神经系统药物 (如 GABA 受体调节剂)。

材料科学: 作为功能单体参与可降解高分子材料的制备。

生化研究: 用于设计酶底物类似物或代谢标记探针。

具体用途示例: 在 β -氨基酸不对称合成中作为关键手性源; 作为液相色谱手性固定相的修饰配体。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中, 惰性气体 (如氮气) 保护可延长稳定性。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。

使用建议: 实验前恢复至室温, 称量时需在干燥环境下操作。建议通过 TLC 或 HPLC 监测反应进程, 因其酯基可能在水相条件下水解。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：批次通过 HPLC（紫外检测器 210nm）测定纯度，手性柱确认光学纯度 > 98%ee。水分含量（KF 法）<0.5%，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴护目镜及丁腈手套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应作为有害化学品处置，避免直接排入下水道。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并进行小试验证。）