

(2S)-1,4-Dioxane-2-carboxylic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-1,4-Dioxane-2-carboxylic acid
产品目录号	
CAS 号	1821739-82-5
分子式	C5H8O4
分子量	132.115
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S)-1,4-二氧六环-2-羧酸 ((2S)-1,4-Dioxane-2-carboxylic acid) 是一种手性有机化合物, 化学式为 $C_5H_8O_4$, 分子量为 132.115。其 CAS 号为 1821739-82-5, 纯度高于 96%。该化合物结构中含有二氧六环环系和羧酸官能团, 具有特定的立体构型 (S 构型), 在不对称合成和生物化学研究中具有重要价值。其物理性质包括白色至类白色固体形态, 可溶于极性有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性砌块, 在生物化学中常用于构建复杂分子骨架, 特别是含氧杂环类化合物的合成。其羧酸基团可参与酯化、酰胺化等反应, 而二氧六环结构则赋予其独特的空间位阻和电子效应, 使其成为酶抑制剂设计或药物中间体开发的关键原料。在代谢途径研究中, 类似结构常作为模拟物用于探索氧原子参与的生物转化机制。

3. 主要应用领域与具体用途

(2S)-1,4-二氧六环-2-羧酸主要应用于三个领域: 一是医药研发, 作为抗病毒或抗肿瘤药物的手性前体; 二是材料科学, 用于合成功能性高分子单体; 三是催化化学, 作为配体修饰的原料。具体用途包括但不限于: 不对称催化反应中的手性助剂、蛋白酶抑制剂的构效关系研究、以及生物相容性材料的改性添加剂。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照和湿气。开封后建议充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF 等惰性溶剂, 若需水相反应, 建议先以少量碱溶液中和羧酸基团。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度 $>96\%$, 手性 HPLC 确认对映体过量值 (ee) $\geq 98\%$ 。该产品对眼

睛和皮肤有轻微刺激性，操作时需遵守 GHS 分类标准（危险类别：刺激性物质）。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入粉尘，应转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地有机废液回收法规，不可直接排入下水系统。

（注：实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS）