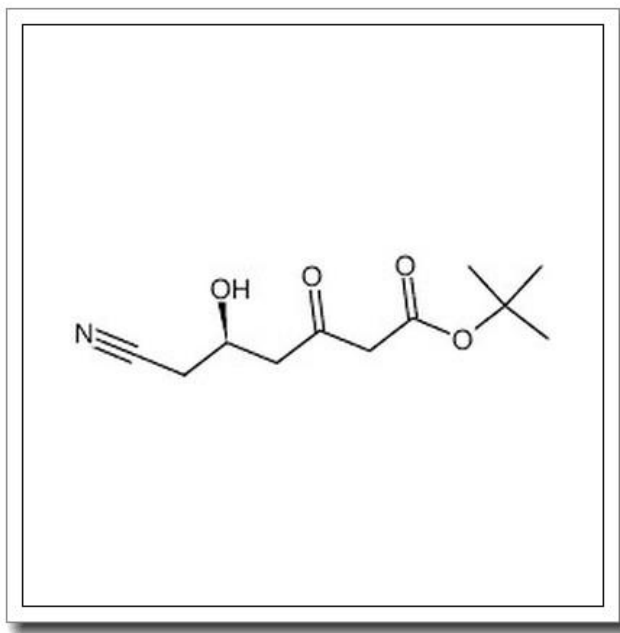


(R)-3-氧代-5-羟基-6-氰基己酸叔丁酯

tert-butyl (5R)-6-cyano-5-hydroxy-3-oxohexanoate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | <i>tert-butyl (5R)-6-cyano-5-hydroxy-3-oxohexanoate</i> |
| 中文名称 | (R)-3-氧代-5-羟基-6-氰基己酸叔丁酯 |
| CAS 号 | 125988-01-4 |
| 分子式 | C ₁₁ H ₁₇ N ₀₄ |
| 分子量 | 227.257 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

以下是专业的产品说明文档:

1. 产品概述与化学特性

(R)-3-氧代-5-羟基-6-氰基己酸叔丁酯 (CAS 125988-01-4) 是一种具有光学活性的有机化合物, 化学式为 $C_{11}H_{17}NO_4$, 分子量 227.257。该化合物属于 β -酮酯类衍生物, 结构中包含叔丁酯保护基、氰基和羟基等重要官能团。产品常温下为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 检测大于 96%。其特有的 (R)-构型在不对称合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性合成砌块, 该化合物可通过羟基和酮基的进一步官能团转化, 参与多种生物活性分子的构建。其结构中的 β -酮酯单元是天然产物和药物分子中常见的药效团, 而氰基的引入增强了分子的反应多样性。在生物代谢途径研究中, 类似结构常作为酶促反应的底物或抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药中间体和精细化学品的合成领域。具体用途包括: 1) 作为关键中间体用于他汀类降脂药物的不对称合成; 2) 用于构建含羟基酮结构的手性化合物; 3) 在有机催化反应中作为手性源; 4) 作为生化试剂用于酶学机理研究。其高光学纯度特性特别适合需要严格立体控制的合成路线。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥避光条件下密封保存, 长期储存推荐充氮保护。使用时应在惰性气体保护下操作, 避免接触强氧化剂和强酸强碱。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于醇类, 几乎不溶于水。实验操作建议在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间稳定性。安全数据表明, 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴防护眼镜和手套。如发生接

触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品处理法规。提供完整的 MSDS 报告备查。