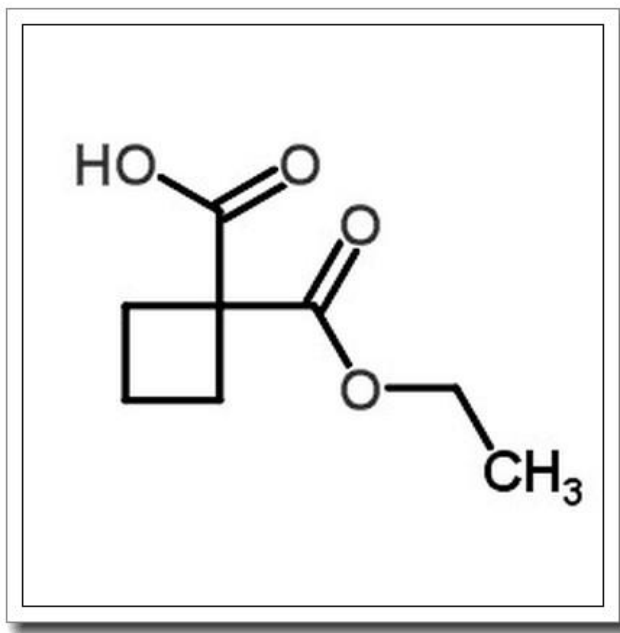


环丁烷-1,1-二羧酸乙酯

1-ethoxycarbonylcyclobutane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-ethoxycarbonylcyclobutane-1-carboxylic acid
中文名称	环丁烷-1,1-二羧酸乙酯
CAS 号	54450-84-9
分子式	C ₈ H ₁₂ O ₄
分子量	172.178
纯度	>96%

产品说明

1-乙氧羰基环丁烷-1-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-乙氧羰基环丁烷-1-羧酸 (1-Ethoxycarbonylcyclobutane-1-carboxylic acid) 是一种环丁烷衍生物，化学式为 $C_8H_{12}O_4$ ，分子量 172.178，CAS 号为 54450-84-9。本品为白色至类白色结晶或粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有羧酸和酯基的双重官能团特性，可溶于常见有机溶剂如乙醇、二氯甲烷，微溶于水。其环丁烷骨架与极性官能团的结合，使其在有机合成中表现出独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为环丁烷类化合物，该分子在药物化学中常用于构建刚性结构或空间位阻，以调节化合物的生物活性。其羧酸基团可参与酰胺化、酯化等反应，而乙氧羰基则可通过水解转化为其他活性基团。这类结构片段在抗生素、抗肿瘤药物及神经活性分子的设计中具有重要价值，尤其在片段库构建和先导化合物优化阶段。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药中间体合成，特别是用于制备含环丁烷结构的靶向药物。具体用途包括：

1. 作为关键砌块用于合成蛋白酶抑制剂或激酶调节剂；
2. 通过开环或官能团转化构建手性环状化合物；
3. 在材料科学中用于合成特殊性能的高分子单体。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于干燥、避光、 -20°C 至 4°C 环境下，避免与氧化剂、强酸强碱接触。使用时建议在惰性气体保护下操作，溶解性测试推荐先以少量 DMSO 或 THF 预溶。长期储存需定期检测纯度，若出现结块或变色应重新纯化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明：

1. 对皮肤和眼睛有轻微刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜；

2. 遇高热可能分解产生刺激性气体，应在通风橱中使用；
3. 废弃物处理需遵守当地化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）