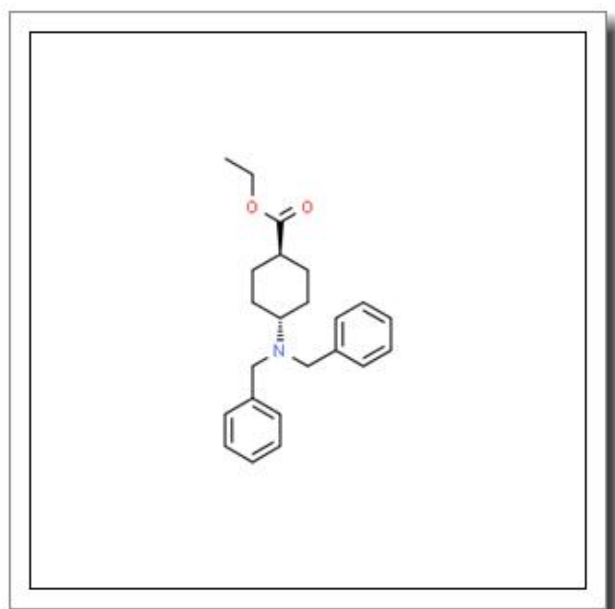


# (1R,4R)-4-(二苄基氨基)环己烷-1-羧酸 乙酯

*Cyclohexanecarboxylic acid, 4-[bis(phenylmethyl)amino]-, ethyl ester, trans-*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Cyclohexanecarboxylic acid, 4-[bis(phenylmethyl)amino]-, ethyl ester, trans-
中文名称	(1R, 4R)-4-(二苄基氨基)环己烷-1-羧酸乙酯
CAS 号	219770-57-7
分子式	C <sub>23</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	351.48
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为(1R, 4R)-4-(二苄基氨基)环己烷-1-羧酸乙酯 (Cyclohexanecarboxylic acid, 4-[bis(phenylmethyl)amino]-, ethyl ester, trans-), CAS 号为 219770-57-7, 分子式为 C<sub>23</sub>H<sub>29</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 351.48。该化合物是一种手性环己烷衍生物, 具有特定的立体构型 (1R, 4R), 纯度不低于 96%。其结构中的二苄基氨基和羧酸乙酯基团赋予其独特的化学性质, 适用于不对称合成和医药中间体制备。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性砌块, 在有机合成中具有重要作用。其刚性环己烷骨架和氨基官能团可参与多种催化反应, 如不对称氢化或偶联反应。二苄基氨基的位阻效应可调控反应立体选择性, 而酯基则便于后续水解或衍生化。在药物研发中, 此类结构常用于构建具有生物活性的分子片段, 如神经递质类似物或酶抑制剂。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成、不对称催化反应及手性配体开发。具体用途包括:

- 1) 作为手性胺类催化剂的前体, 用于酮类的不对称还原反应;
- 2) 合成抗抑郁或抗帕金森病药物的关键中间体;
- 3) 用于构建多环生物碱类化合物的核心结构。

### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度控制在 2-8°C。长期保存需充惰性气体 (如氮气)。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性低, 建议先以少量有机溶剂预溶后再参与反应。

### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据:

- 1) 穿戴防护手套、护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤;

2) 如不慎接触眼睛, 立即用大量清水冲洗并就医;

3) 废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

本产品仅供科研用途, 不适用于食品或药品直接生产。