

# (1r,4r)-乙基 4-甲酰基环己烷羧酸

*(1R, 4R)-Ethyl 4-formylcyclohexanecarboxylate*

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 4R)-Ethyl 4-formylcyclohexanecarboxylate
中文名称	(1r, 4r)-乙基 4-甲酰基环己烷羧酸
CAS 号	104802-53-1
分子式	C10H16O3
分子量	184.232
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

(1R, 4R)-乙基 4-甲酰基环己烷羧酸 (CAS 号: 104802-53-1) 是一种高纯度手性化合物, 分子式为  $C_{10}H_{16}O_3$ , 分子量为 184.232。该产品为无色至淡黄色液体, 具有特征性醛基气味, 纯度  $\geq 96\%$ 。其化学结构包含乙酯基和甲酰基官能团, 且环己烷骨架为 1,4-反式构型, 这一特性使其在立体选择性合成中具有重要价值。该化合物易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和氯仿, 但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为手性合成子, 该化合物在不对称催化反应中表现出优异的立体选择性, 尤其适用于构建含环己烷结构的复杂分子。甲酰基的高反应活性使其可作为关键中间体参与还原胺化、Wittig 反应及缩合反应, 广泛应用于药物活性分子的合成。其反式构型还能有效调控产物的空间构象, 在药物设计中用于优化靶标结合能力。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和精细化工领域。在药物化学中, 常用于合成抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的手性片段。具体可参与以下反应: 1) 与格氏试剂反应制备仲醇衍生物; 2) 作为前体合成含环己基的  $\beta$ -氨基酸; 3) 用于构建天然产物中的六元环结构。在材料科学领域, 可作为液晶材料的中间体。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存, 温度控制在  $2-8^{\circ}\text{C}$ , 避光保存。开封后需充氮气保护并尽快使用。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。避免与强氧化剂、强还原剂接触。因醛基易氧化, 建议现配现用, 反应溶剂需严格脱水。

### 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, 确保立体纯度和化学纯度达标。安全数据: 1) GHS 分类为刺激性物质 (类别 2); 2) 避免吸入或皮肤接触; 3) 如接触眼睛需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理应遵守当地化学品处

置法规，不可直接排入下水道。提供完整的 COA（分析证书）和 MSDS（材料安全数据表）备查。