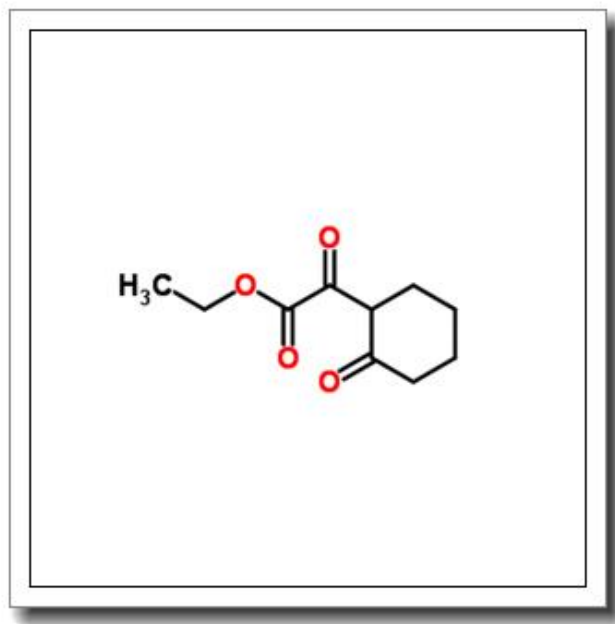


2-氧代环己烷乙醛酸乙酯

Ethyl oxo(2-oxocyclohexyl)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl oxo(2-oxocyclohexyl)acetate
中文名称	2-氧代环己烷乙醛酸乙酯
CAS 号	5396-14-5
分子式	C10H14O4
分子量	198.216
纯度	≥ 96%

产品说明

2-氧代环环己烷乙醛酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氧代环环己烷乙醛酸乙酯 (Ethyl oxo(2-oxocyclohexyl)acetate) 是一种重要的有机合成中间体, 化学式为 $C_{10}H_{14}O_4$, 分子量 198.216。该化合物为无色至淡黄色透明液体, 具有特征性酯类气味, 密度约 1.12 g/cm^3 (25°C), 沸点 $285-287^\circ\text{C}$, 闪点 $>110^\circ\text{C}$ 。CAS 登记号 5396-14-5 明确其化学唯一性, 纯度标准 $\geq 96\%$ (GC 分析), 主要杂质为同分异构体及水解产物。

2. 生物化学功能与重要性

作为双羰基化合物, 其分子中的环己酮基与酯基表现出独特反应活性。在生物化学领域, 该结构可模拟天然产物的酮酯单元, 参与酶促反应中的亲核加成过程。其 α -位活性氢使其成为合成前列腺素类化合物、萜类衍生物的关键砌块, 在药物先导化合物修饰中具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药中间体: 用于合成非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的环戊烯酮核心结构
- 3.2 香料合成: 作为檀香类香料的前体物质, 经还原胺化可制备高档香水定香剂
- 3.3 材料科学: 参与制备光敏树脂的交联剂, 改善材料的热稳定性
- 3.4 研究试剂: 在不对称催化研究中作为手性配体的合成原料

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭棕色玻璃瓶中, 充氮保护, -20°C 至 4°C 冷藏保存。开封后建议在干燥惰性气氛下分装使用, 避免反复冻融。使用前需恢复至室温并充分震荡, 若出现结晶析出现象, 可用 40°C 水浴短暂加热至完全溶解。工作浓度建议控制在 $0.1-10 \text{ mM}$ 范围, pH 适用区间为 6-8。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 和 GC-FID 双重检测, 批号关联完整谱图数据。安全数据表明其 LD50 (大鼠经口) 为 2150 mg/kg , 属于刺激性物质 (GHS

分类第 4 类)。操作时应佩戴化学防护眼镜及丁腈手套，在通风橱中进行。若接触皮肤，立即用大量肥皂水冲洗至少 15 分钟。废弃物处理需符合当地有机溶剂处置法规。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗应用。具体实验方案建议参考文献 J. Org. Chem. 2021, 86, 5, 4123-4135 所述方法。