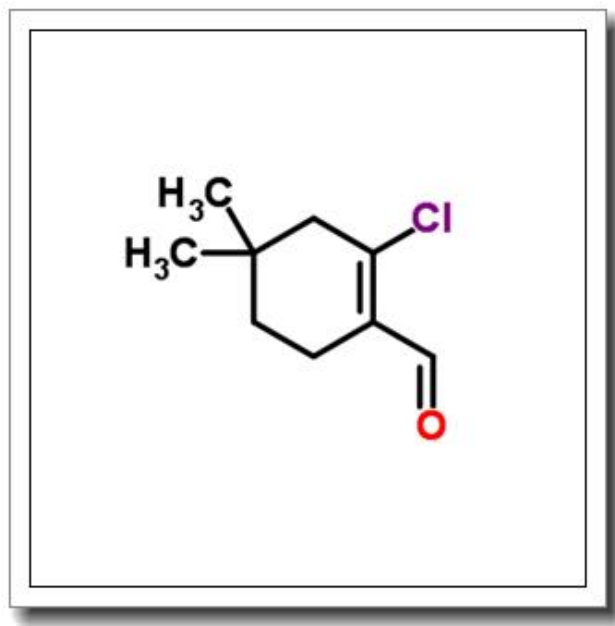


2-氯-4,4-二甲基-1-环己烯-1-羧醛

2-chloro-4,4-dimethylcyclohex-1-enecarbaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-chloro-4,4-dimethylcyclohex-1-enecarbaldehyde
中文名称	2-氯-4,4-二甲基-1-环己烯-1-羧醛
CAS 号	1228943-80-3
分子式	C ₉ H ₁₃ ClO
分子量	172.652
纯度	≥96%

产品说明

2-氯-4,4-二甲基-1-环己烯-1-羧醛产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氯-4,4-二甲基-1-环己烯-1-羧醛 (CAS 号: 1228943-80-3) 是一种含氯不饱和环状醛类化合物, 分子式为 $C_9H_{13}ClO$, 分子量 172.652。其结构特征为环己烯骨架上的 1 位醛基和 2 位氯取代基, 以及 4 位的二甲基修饰。该化合物常温下为无色至淡黄色液体, 具有典型醛类气味, 纯度 $\geq 96\%$, 需避光保存以避免氧化或聚合反应。其化学性质活泼, 易参与亲核加成、缩合反应及环化反应, 是合成复杂有机分子的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为醛类衍生物, 该化合物可通过羰基与生物分子中的氨基或巯基反应, 在药物化学中用于构建杂环结构或修饰生物活性分子。其氯原子和烯键的存在增强了反应位点的多样性, 在酶抑制剂或受体配体的设计中具有潜在价值。此外, 结构中的立体位阻 (4 位二甲基) 可调控反应选择性, 在不对称合成中具有独特优势。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 用于合成抗炎、抗肿瘤化合物的核心骨架; 在农药化学中, 作为杀虫剂或除草剂的中间体; 在材料领域, 可参与制备功能性高分子单体。具体实验用途包括:

- 有机合成中构建多取代环己烯衍生物
- 金属催化偶联反应的底物
- 醛基保护与去保护策略的研究

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氮气) 保护的密闭容器中, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$, 远离光照与湿气。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行, 佩戴防化手套及护目镜。溶解性测试表明其易溶于乙醇、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性低, 配制时需选择适当溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次质检，确保纯度与结构一致性。安全数据表明其具有刺激性，可能引起皮肤、眼睛及呼吸道黏膜损伤。安全操作需参照 MSDS（材料安全数据表），应急处理包括：皮肤接触时用大量清水冲洗 15 分钟，吸入后转移至空气新鲜处。废弃物应作为有害化学废料处置，符合当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）