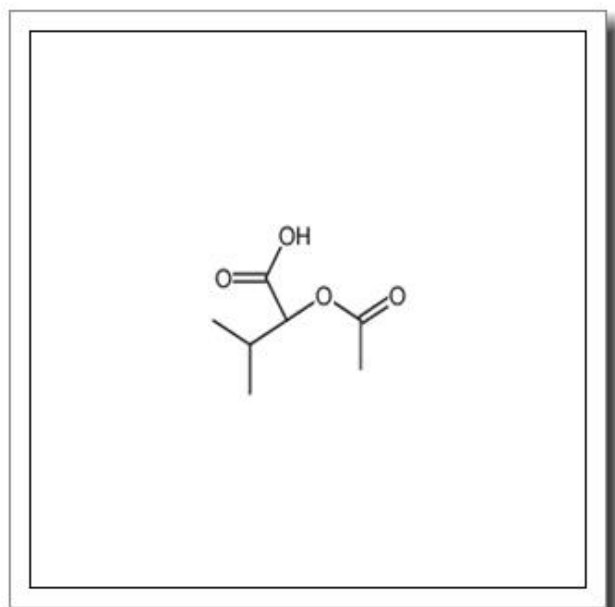


(2R)-2-acetyloxy-3-methylbutanoic acid

(2R)-2-acetyloxy-3-methylbutanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2R)-2-acetyloxy-3-methylbutanoic acid
中文名称	(2R)-2-acetyloxy-3-methylbutanoic acid
CAS 号	44976-78-5
分子式	C7H12O4
分子量	160.168
纯度	≥ 96%

产品说明

(2R)-2-乙酰氧基-3-甲基丁酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(2R)-2-乙酰氧基-3-甲基丁酸 (CAS 号: 44976-78-5) 是一种手性有机羧酸衍生物, 分子式为 $C_7H_{12}O_4$, 分子量 160.168。该化合物以单一对映异构体形式存在 (R 构型), 纯度 $\geq 96\%$, 常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有酯键和羧酸双官能团特性。其乙酰氧基与甲基支链结构赋予独特的空间位阻效应, 在酸碱催化条件下可发生选择性水解或酯化反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性合成子, 该分子在酶促反应中表现出显著的立体选择性, 尤其适用于酯酶或脂肪酶催化的动力学拆分。其 3-甲基丁酸骨架与某些天然代谢产物 (如亮氨酸衍生物) 结构相似, 可作为前体用于合成生物活性分子。在辅酶 A 结合反应中, 乙酰氧基的活化特性使其成为研究酰基转移机制的工具化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体: 用于合成非甾体抗炎药或抗病毒药物的手性侧链
- 不对称催化: 作为配体修饰的原料参与过渡金属催化剂设计
- 生化研究: 模拟短链脂肪酸代谢途径的探针分子
- 材料科学: 制备具有光学活性的聚合物单体

4. 储存条件与使用建议

推荐在 -20°C 惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温以避免冷凝水污染。在有机溶剂 (如无水 THF 或 DCM) 中溶解性良好, 建议现配现用。反应体系中需控制 $\text{pH} > 5$ 以防止酯键过早水解。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (C18 柱, 甲醇/水梯度洗脱) 测定纯度, 手性柱确认光学纯度 $\geq 98\%$ 。核磁共振 ($^1\text{H}/^{13}\text{C}$ NMR) 与质谱 (ESI-MS) 用于结构验证。

安全警示: 具刺激性, 操作时需佩戴防化手套及护目镜。皮肤接触后立即用大量肥皂水冲洗。废弃物应作为有害有机溶剂处理, 遵守当地环保法规。

(本产品仅供科研用途, 不适用于诊断或治疗用途)