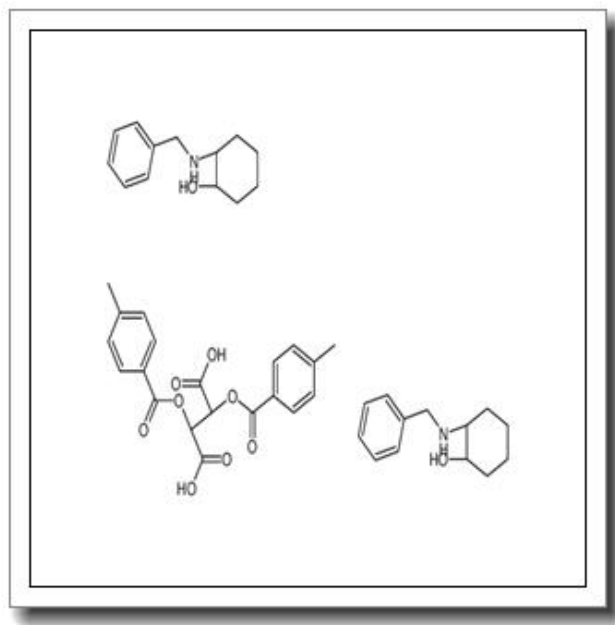


(2R,3R)-2,3-Bis[(4-methylbenzoyl)oxy]succinic acid-(1R,2R)-2-(benzylamino)cyclohexanol (1:2)

(2R, 3R)-2, 3-Bis[(4-methylbenzoyl)oxy]succinic acid-(1R, 2R)-2-(benzylamino)cyclohexanol (1:2)



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2R, 3R)-2, 3-Bis[(4-methylbenzoyl)oxy]succinic acid-(1R, 2R)-2-(benzylamino)cyclohexanol (1:2)
中文名称	(2R, 3R)-2, 3-Bis[(4-methylbenzoyl)oxy]succinic acid-(1R, 2R)-2-(benzylamino)cyclohexanol (1:2)
CAS 号	1106691-66-0

分子式	C ₄₆ H ₅₆ N ₂ O ₁₀
分子量	796.944
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(2R, 3R)-2, 3-双[(4-甲基苯甲酰)氧基]琥珀酸-(1R, 2R)-2-(苄氨基)环己醇(1:2)复合物, 化学名称(2R, 3R)-2, 3-Bis[(4-methylbenzoyl)oxy]succinic acid-(1R, 2R)-2-(benzylamino)cyclohexanol (1:2), CAS 号 1106691-66-0。其分子式为 C₄₆H₅₆N₂O₁₀, 分子量 796.944, 纯度 ≥96%。该化合物为立体构型明确的非对称分子, 结构中包含琥珀酸酯与环己醇胺的复合配比, 具有特定的手性中心, 需避光保存以维持稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过其独特的双酯键和氨基醇结构, 可作为手性催化剂或中间体参与不对称合成反应。其苯甲酰氧基团赋予疏水性, 而琥珀酸骨架则增强水溶性, 这种两亲性使其在跨膜传递研究中具有潜在应用价值。在酶抑制实验中, 其刚性环己醇结构可能模拟天然底物构象, 适用于受体结合研究。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 包括但不限于:

- 作为手性助剂用于 β-内酰胺类抗生素的立体选择性合成
- 神经递质类似物开发中的结构模板
- 体外酶活性测试的竞争性抑制剂
- 高分子材料改性中的功能性交联剂

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃惰性气体环境中, 开封后需充氩气密封。使用前需平衡至室温以避免结露, 溶解推荐使用无水 DMSO (浓度 ≤10mM)。工作液需现配现用, 避免反复冻融。操作时应佩戴防渗透手套及护目镜, 在通风橱中进行称量。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 归一化法检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。急性毒性数据 (大鼠口服 LD₅₀) 为 820mg/kg, 属于刺激性物质 (GHS 分类 Category 2)。泄露

处理需用惰性吸附材料收集，禁止直接用水冲洗。废弃物处置应遵循当地危险化学品管理法规，建议采用高温焚烧法处理。