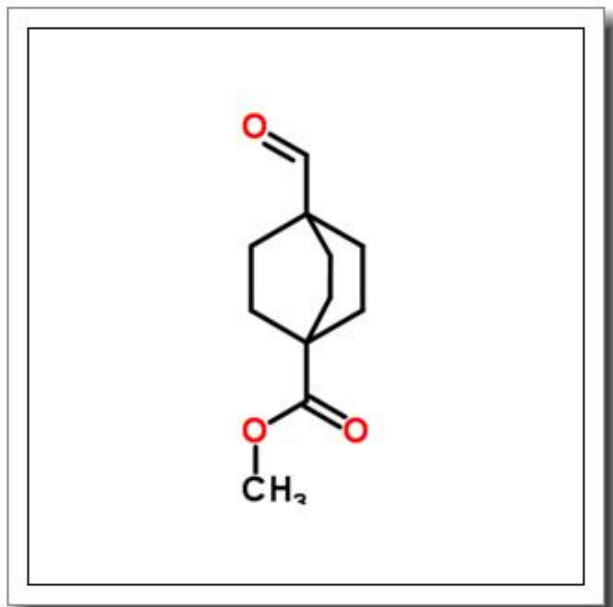


4-甲酰基双环并[2.2.2]辛烷-1-甲酸甲酯

methyl 1-formylbicyclo[2.2.2]octane-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 1-formylbicyclo[2.2.2]octane-4-carboxylate
中文名称	4-甲酰基双环并[2.2.2]辛烷-1-甲酸甲酯
CAS 号	94994-25-9
分子式	C ₁₁ H ₁₆ O ₃
分子量	196.243
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为甲基 1-甲酰基双环[2.2.2]辛烷-4-羧酸酯 (methyl 1-formylbicyclo[2.2.2]octane-4-carboxylate), CAS 号 94994-25-9, 分子式 C₁₁H₁₆O₃, 分子量 196.243。外观通常为无色至淡黄色液体或结晶性固体, 纯度 ≥96%。其结构特征为双环[2.2.2]辛烷骨架, 兼具甲酰基和酯基官能团, 赋予其独特的反应活性, 如参与亲核加成、缩合反应及过渡金属催化转化等。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成中作为关键中间体, 其刚性双环结构可稳定过渡态, 常用于构建复杂手性分子或药物骨架。甲酰基与酯基的协同作用使其成为多官能团化反应的理想底物, 尤其在天然产物全合成和药物修饰中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品可用于合成镇痛剂、抗炎药或神经活性分子的核心片段; 在材料科学中, 可作为功能化聚合物的单体或交联剂。此外, 其衍生物在不对称催化、荧光探针设计及农药中间体制备中亦有应用。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于-20℃至 4℃干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后建议充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套与护目镜, 于通风橱中操作。溶解性测试表明易溶于氯仿、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱确保纯度 ≥96%, 批次间稳定性良好。本品对眼睛和皮肤有刺激性, 接触后立即用大量清水冲洗。安全数据表 (SDS) 显示其属于非易燃物, 但需远离强氧化剂。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

注: 具体实验方案建议参考文献报道的优化条件, 并根据实际需求调整投料比与反应温度。