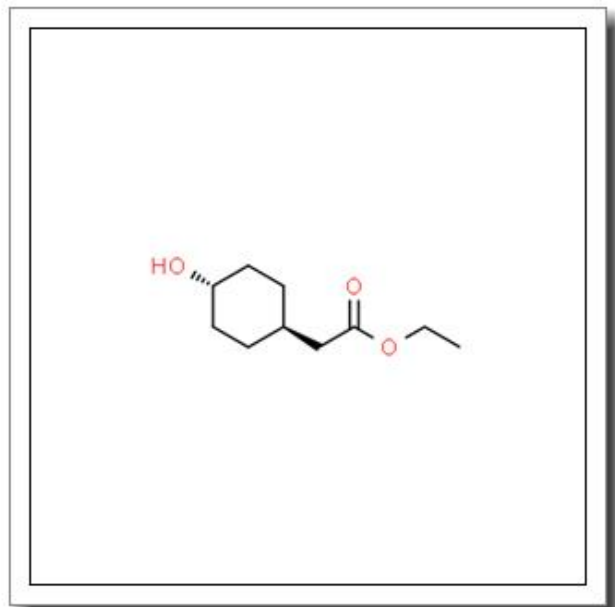


乙基 2-((1R,4R)-4-羟基环己基)乙酸乙酯

Cyclohexaneacetic acid, 4-hydroxy-, Ethyl ester, trans-



产品基本信息

属性	值
化学名称	Cyclohexaneacetic acid, 4-hydroxy-, Ethyl ester, trans-
中文名称	乙基 2-((1R,4R)-4-羟基环己基)乙酸乙酯
CAS 号	116941-05-0
分子式	C10H18O3
分子量	186.25
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

乙基 2-((1R, 4R)-4-羟基环己基)乙酸乙酯 (CAS 号: 116941-05-0) 是一种具有特定立体构型的环己烷衍生物, 分子式为 C₁₀H₁₈O₃, 分子量为 186.25。该化合物以反式构型存在, 纯度不低于 96%, 常温下为无色至淡黄色液体。其结构中包含羟基和酯基官能团, 赋予其一定的极性和反应活性, 适合作为手性合成中间体或生物活性分子修饰的原料。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有潜在的应用价值。其环己烷骨架和手性中心使其可能作为酶抑制剂或受体配体的结构单元。羟基和酯基的存在提供了进一步衍生化的可能性, 例如通过酯水解或羟基的官能团转化, 可合成具有药理活性的分子。在天然产物全合成中, 此类结构片段常用于构建复杂环系或引入立体化学控制。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 该产品可作为手性砌块用于抗炎、抗肿瘤等药物的合成。在材料科学领域, 其刚性环己烷结构可用于液晶材料的制备。此外, 在香料工业中, 酯类衍生物常作为香气成分的前体。具体实验用途包括但不限于: 不对称催化反应的底物、高分子单体修饰剂、以及生物标记物的合成中间体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的惰性气体 (如氮气) 环境下避光保存, 长期储存需置于干燥密封容器中。使用前需恢复至室温并充分搅拌以确保均匀性。实验操作应在通风良好的环境中进行, 避免与强氧化剂或强酸接触。开封后建议一次性使用完毕, 或重新充氮密封保存。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 双重验证, 确保立体构型正确性和化学纯度。安全数据表明, 该物质可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴防护眼镜和手套。如发生泄

漏，需用惰性吸附材料处理并按照危险化学品废弃物处置规范处理。详细毒理学数据请参阅产品安全技术说明书（MSDS）。