

小茴香醇

(1S, 3R, 4R)-2, 2, 4-trimethylbicyclo[2. 2. 1]heptan-3-ol

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(1S, 3R, 4R)-2, 2, 4-trimethylbicyclo[2. 2. 1]heptan-3-ol
中文名称	小茴香醇
CAS 号	2217-02-09 00:00:00
分子式	C10H18O
分子量	154. 249
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(1S, 3R, 4R)-2, 2, 4-三甲基双环[2. 2. 1]庚烷-3-醇，中文名称为小茴香醇，是一种具有独特双环结构的单萜醇类化合物。其分子式为 C₁₀H₁₈O，分子量为 154. 249，CAS 号为 2217-02-09。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度不低于 96%。其立体构型(1S, 3R, 4R)决定了其光学活性和特异性相互作用能力，双环[2. 2. 1]庚烷骨架赋予分子较高的刚性，使其在不对称合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

小茴香醇是植物次生代谢产物，广泛存在于伞形科植物中，尤其在茴香精油中含量较高。作为单萜类化合物，它可通过甲羟戊酸途径生物合成，在植物防御系统和化感作用中扮演关键角色。其分子中的羟基和立体位阻使其能够与多种酶活性位点特异性结合，因此在香料合成和手性催化剂领域具有不可替代性。

3. 主要应用领域与具体用途

在香料工业中，小茴香醇是合成龙涎香类香料的重要前体，其特有的木香-樟脑香气可用于高档香水调配。医药领域则利用其作为手性合成子，用于构建抗病毒药物中间体。此外，在不对称催化反应中，该化合物可作为手性配体的核心骨架。近期研究还发现其在昆虫信息素模拟方面的潜在应用价值。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光保存于 2-8℃ 惰性气体环境中，长期储存建议充氩气密封。开封后应在干燥箱中操作，相对湿度需控制在 40% 以下。使用前需进行熔点复核（文献值 82-84℃）和旋光度检测（ $[\alpha]_{D20}$ 应为 +15° 至 +18°）。实验级应用推荐在氮气保护下进行衍生化反应，工业级使用需注意粉尘防爆措施。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 GC-MS 和手性 HPLC 双重验证，确保对映体过量值 (ee) ≥ 98%。危险类别为 Xi（刺激性物质），操作时应佩戴防尘口罩和化学护目镜。如接触皮肤，需

立即用聚乙二醇 400 冲洗。废弃物处理需符合《国家危险废物名录》HW13 类要求，不可直接排入下水系统。运输分类为 UN3077，需贴注环境危害副标签。