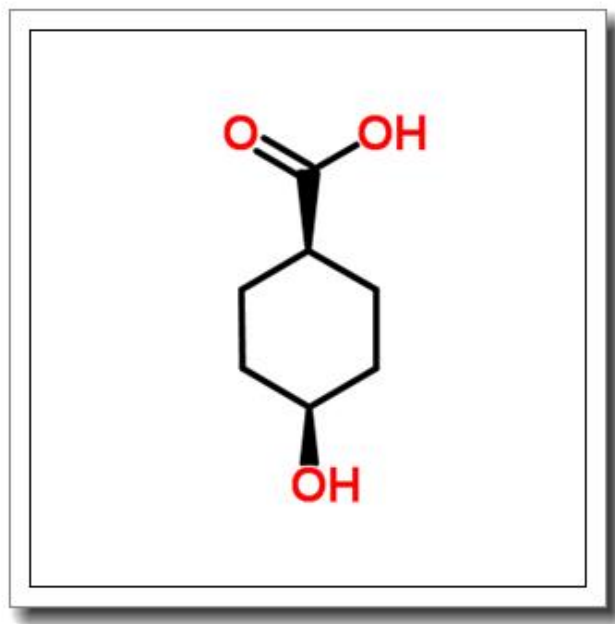


顺-4-羟基环己甲酸

trans-4-hydroxycyclohexanecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	trans-4-hydroxycyclohexanecarboxylic acid
中文名称	顺-4-羟基环己甲酸
CAS 号	3685-22-1
分子式	C ₇ H ₁₂ O ₃
分子量	144.168
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

trans-4-hydroxycyclohexanecarboxylic acid (顺-4-羟基环己甲酸) 是一种环状有机化合物, 化学式为 C₇H₁₂O₃, 分子量为 144.168。该化合物为白色至类白色结晶粉末, CAS 号为 3685-22-1, 纯度通常不低于 96%。其结构特征为环己烷骨架上的 4 位羟基与羧基处于反式构型, 这一特殊构象使其在立体化学和生物活性研究中具有重要价值。该物质易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、乙醇), 微溶于水, 熔点为 160-165° C, 需避光保存以避免降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为环己烷衍生物, 该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体。其羟基和羧基官能团可参与酯化、缩合等反应, 常用于手性药物或天然产物的结构修饰。在代谢研究中, 其类似物常作为酶抑制剂或底物模拟物, 用于探究羧酸水解酶或脱氢酶的催化机制。此外, 其刚性环状结构对药物分子的构效关系研究具有参考意义。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品是合成抗炎药、抗肿瘤剂及心血管药物的重要砌块, 例如用于制备非甾体抗炎药的衍生物。在材料科学中, 可作为液晶单体或高分子聚合物的改性剂。科研用途包括: 有机合成实验教学、不对称催化反应研究、以及作为核磁共振 (NMR) 标准品用于构型分析。

4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于 2-8° C 的干燥环境中, 避免与强氧化剂接触。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。若需溶解, 推荐使用预冷的乙醇以减少副反应。长期储存建议定期检测纯度 (HPLC 法)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次验证, 确保杂质含量低于 4%。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD₅₀ 大鼠口服 >2000 mg/kg), 但仍可能引起眼睛和皮肤刺

激。意外接触时需立即用大量清水冲洗，并就医观察。废弃物处理应遵循当地法规，不可直接排入下水道。

（注：实际使用前请查阅最新版安全技术说明书（MSDS）并严格遵循实验室安全规程。）