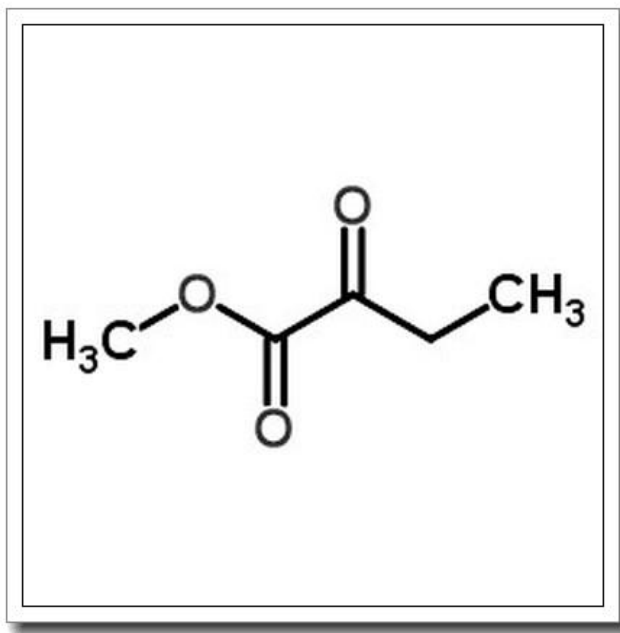


2-氧代丁酸甲酯

Methyl 2-Oxobutanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-Oxobutanoate
中文名称	2-氧代丁酸甲酯
CAS 号	3952-66-7
分子式	C ₅ H ₈ O ₃
分子量	116.115
纯度	>96%

产品说明

2-氧代丁酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氧代丁酸甲酯 (Methyl 2-Oxobutanoate) 是一种重要的有机酯类化合物，化学式为 $C_5H_8O_3$ ，分子量为 116.115，CAS 号为 3952-66-7。本品为无色至淡黄色液体，具有典型的酯类气味，沸点约为 $145-150^{\circ}C$ ，密度 1.09 g/cm^3 ($20^{\circ}C$)。其结构中包含活性酮基和酯基，易参与缩合、还原等有机反应。本产品纯度 $>96\%$ ，适合对杂质敏感的生化反应和合成应用。

2. 生物化学功能与重要性

作为 α -酮酸酯衍生物，2-氧代丁酸甲酯是生物体内氨基酸代谢（如缬氨酸、异亮氨酸）的中间体类似物，可模拟相关代谢途径。其酮羰基在酶催化反应中可作为酰基受体或供体，在生物合成研究中用于探究转氨酶、脱氢酶等酶的作用机制。此外，它是合成手性药物和天然产物的关键砌块，尤其在 β -氨基酸衍生物制备中具有不可替代性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于以下领域：

- 3.1 医药中间体：用于合成抗癫痫药物、抗生素及抗肿瘤化合物前体。
- 3.2 生化研究：作为代谢通路抑制剂或探针，研究支链氨基酸代谢异常相关疾病。
- 3.3 香料合成：通过酯交换反应制备果香型香料成分。
- 3.4 有机合成：参与 Stetter 反应、Michael 加成等构建碳-碳键的反应。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于阴凉干燥处（建议 $2-8^{\circ}C$ 冷藏），避免光照和湿气。开封后需充氮保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入蒸气。与强氧化剂、强碱分开存放。溶解性测试表明，本品易溶于乙醇、乙醚，微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，水分含量<0.5%，重金属残留符合 USP 标准。安全数据：GHS 分类为刺激性物质（类别 2），安全术语 H319（造成严重眼刺激）。操作时需佩戴护目镜、防化手套，若接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规。

注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件验证。更多技术参数可索取 COA 报告。