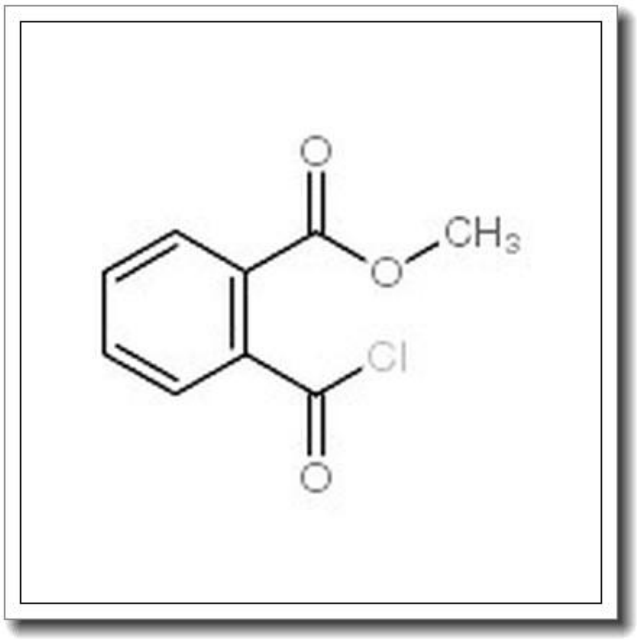
2-(氯羰基)苯甲酸甲酯

methyl 2-carbonochloridoylbenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 2-carbonochloridoylbenzoate
中文名称	2-(氯羰基)苯甲酸甲酯
CAS 号	4397-55-1
分子式	C9H7ClO3
分子量	198.603
纯度	>96%

产品说明

2-(氯羰基)苯甲酸甲酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-(氯羰基)苯甲酸甲酯（methyl 2-carbonochloridoylbenzoate）是一种重要的有机合成中间体，化学式为 C9H7ClO3，分子量为 198.603，CAS 号为 4397-55-1。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体，纯度通常高于 96%。其分子结构中包含活性较高的氯羰基（-COCl）和甲酯基（-COOCH3），使其在酰化反应中表现出高反应活性。该化合物易溶于有机溶剂（如二氯甲烷、乙醚），但在水中易水解，需避免潮湿环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为酰氯类化合物，2-(氯羰基)苯甲酸甲酯在生物化学领域主要用于构建酰胺键或酯键，是合成药物活性分子和生物标记物的关键中间体。其氯羰基可与氨基或羟基快速反应，广泛应用于肽类化合物、酶抑制剂及荧光探针的制备。此外，该化合物在杂环化合物合成中具有重要价值，常用于喹啉、异吲哚酮等骨架的构建。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药化学：用于抗生素、抗肿瘤药物及心血管药物的中间体合成，如非甾体抗炎药的修饰。
- 材料科学：参与高分子材料的改性，如聚酯和聚酰胺的单体制备。
- 农药研发：作为杀虫剂或除草剂合成中的酰化试剂。
- 学术研究：在有机合成方法学中用于探索新型催化反应或机理研究。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件：需密封保存于干燥、阴凉处（建议 2-8℃），避免与湿气接触。长期储存建议充入惰性气体（如氮气）保护。
- 使用建议：操作时需在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。开封后应尽快使用，剩余试剂需重新密封。溶解或反应建议使用无水溶剂（如干燥 THF 或 DMF）。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：产品通过 HPLC 检测，纯度≥96%，水分含量控制在 0.5%以下。
- 安全信息：本品具有腐蚀性和刺激性，接触皮肤或眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。运输时归类为 8 类危险品（腐蚀性物质），需符合 UN3265 包装规范。废弃处理需遵循当地环保法规，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研或工业用途，不适用于食品、药品或家庭使用。