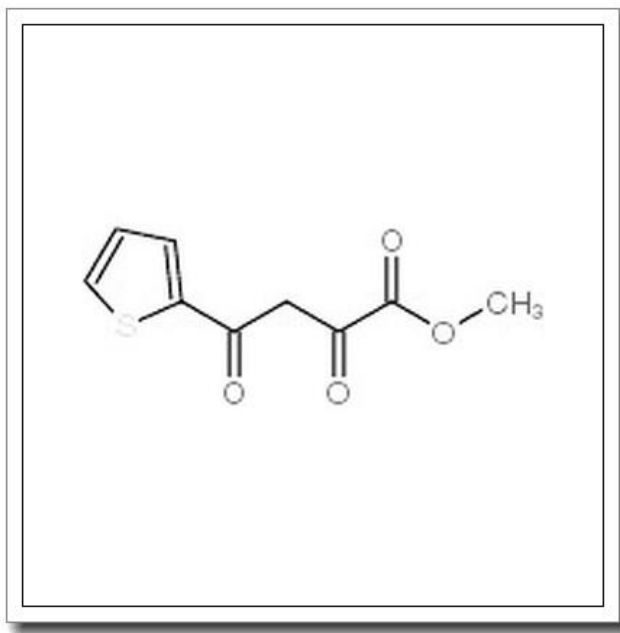


2,4-二氧代-4-噻吩-2-基丁酸甲酯

Methyl 2,4-dioxo-4-(thiophen-2-yl)butanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2,4-dioxo-4-(thiophen-2-yl)butanoate
中文名称	2,4-二氧代-4-噻吩-2-基丁酸甲酯
CAS 号	57409-51-5
分子式	C ₉ H ₈ O ₄ S
分子量	212.222
纯度	>96%

产品说明

2,4-二氧代-4-噻吩-2-基丁酸甲酯 (Methyl 2,4-dioxo-4-(thiophen-2-yl)butanoate) 是一种重要的有机合成中间体, CAS 号为 57409-51-5, 分子式为 C₉H₈O₄S, 分子量为 212.222。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度大于 96%, 具有噻吩环和 β-酮酯结构特征, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 在药物化学和材料科学领域具有广泛的应用价值。

1. 产品概述与化学特性

该化合物结构中含有活性羰基和酯基, 化学性质活泼, 可参与缩合、环化等多种有机反应。噻吩环的引入赋予其独特的电子效应, 使其在杂环化合物合成中表现优异。其熔点和沸点数据需通过实验测定, 建议在使用前通过核磁共振 (NMR) 或高效液相色谱 (HPLC) 进一步验证纯度。

2. 生物化学功能与重要性

作为 β-酮酯类衍生物, 该物质在生物活性分子构建中具有重要作用, 可能作为酶抑制剂或受体配体的合成前体。其结构中的噻吩环常见于抗炎、抗肿瘤药物中, 因此在药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物合成: 用于构建噻吩并杂环化合物, 如抗病毒或抗菌药物的中间体。
- 材料科学: 作为有机光电材料的合成单元, 用于开发新型聚合物或小分子半导体。
- 化学研究: 在有机方法学中作为底物, 研究新型催化反应或官能团转化。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光、密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体。使用时应穿戴防护装备 (手套、护目镜等), 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解时建议使用无水溶剂以减少水解风险。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 确保纯度 >96%。安全数据表明, 其可能对眼睛和皮肤有刺

激性，操作应在通风橱中进行。废弃物需按危险化学品规范处置。具体毒理学数据请参考材料安全数据表（MSDS），并遵守当地法规。

注：以上信息基于现有研究数据，实际应用前请进行充分验证。