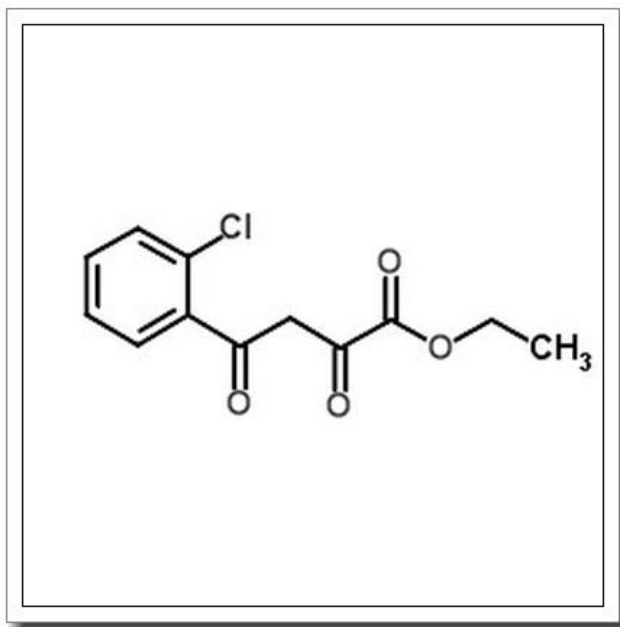


4-(2-氯苯基)-2,4-二氧代丁酸乙酯

Ethyl 4-(2-chlorophenyl)-2,4-dioxobutanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4-(2-chlorophenyl)-2,4-dioxobutanoate
中文名称	4-(2-氯苯基)-2,4-二氧代丁酸乙酯
CAS 号	338982-35-7
分子式	C ₁₂ H ₁₁ ClO ₄
分子量	254.666
纯度	>96%

产品说明

4-(2-氯苯基)-2,4-二氧代丁酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Ethyl 4-(2-chlorophenyl)-2,4-dioxobutanoate, 中文名称为 4-(2-氯苯基)-2,4-二氧代丁酸乙酯, CAS 号为 338982-35-7。其分子式为 $C_{12}H_{11}ClO_4$, 分子量为 254.666, 纯度高于 96%。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如乙醇、丙酮和乙醚, 微溶于水。其结构中的氯苯基和二氧代丁酸乙酯基团赋予其独特的化学反应活性, 适合作为有机合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为酶抑制剂或信号分子前体的关键合成砌块。其 β -二酮结构能够与金属离子螯合, 可能参与调控某些生物酶的活性。在药物研发中, 此类结构常被用于设计靶向特定蛋白的小分子化合物, 尤其在抗炎和抗肿瘤药物开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药中间体合成、农药化学及材料科学领域。具体用途包括但不限于: 作为非甾体抗炎药物 (NSAIDs) 的合成前体; 用于构建含氯苯基的杂环化合物; 在农药研发中作为杀菌剂或除草剂的活性组分。此外, 其特殊结构也可用于功能材料如液晶或光敏材料的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护并密封保存, 以防氧化或降解。使用时应佩戴防护手套、护目镜及实验服, 在通风橱中操作。溶解时优先选用无水乙醇或二甲基亚砜 (DMSO), 配制溶液建议现配现用, 长期储存需检测稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间质量稳定。潜在危害包括皮肤刺激性和眼睛损伤 (GHS 分类: H315/H319), 操作时需遵守化学品通用防护规范。如接触皮

肤，立即用大量清水冲洗；若吸入粉尘，转移至空气新鲜处。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）