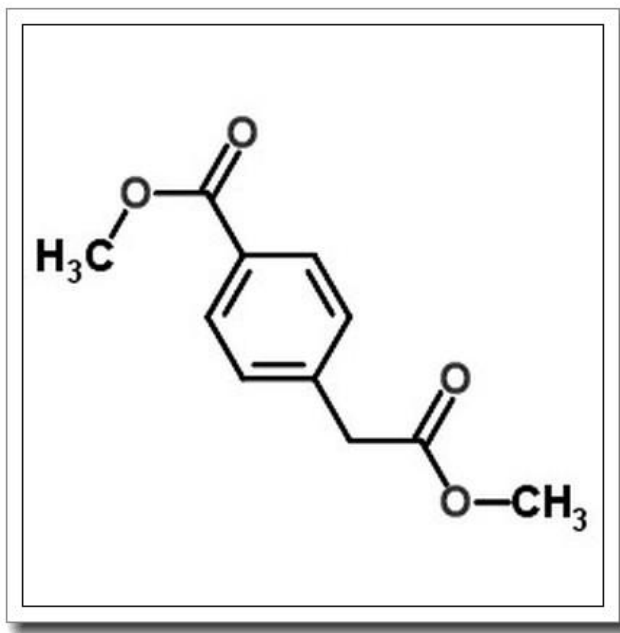


4-甲酸甲酯苯乙酸甲酯

Methyl 4-(2-methoxy-2-oxoethyl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-(2-methoxy-2-oxoethyl)benzoate
中文名称	4-甲酸甲酯苯乙酸甲酯
CAS 号	52787-14-1
分子式	C ₁₁ H ₁₂ O ₄
分子量	208.211
纯度	>96%

产品说明

4-甲酸甲酯苯乙酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-甲酸甲酯苯乙酸甲酯 (Methyl 4-(2-methoxy-2-oxoethyl)benzoate) 是一种芳香族羧酸酯类化合物，化学式为 $C_{11}H_{12}O_4$ ，分子量 208.211，CAS 号为 52787-14-1。本品为白色至类白色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有酯类特有的微弱芳香气味。其结构中包含苯甲酸甲酯基团和乙酸甲酯侧链，赋予其良好的脂溶性和反应活性，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合成砌块 (building block)，用于构建更复杂的药物分子或功能材料。其酯基结构可参与水解、缩合等反应，是合成非甾体抗炎药、液晶材料及光敏剂的关键前体。在代谢研究中，类似结构的酯类化合物常被用作酶底物或抑制剂探针。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品可用于制备抗炎、抗肿瘤药物的中间体，如某些 COX-2 抑制剂衍生物。在材料科学领域，其苯环结构可作为液晶材料的刚性核心单元。此外，在农用化学品合成中，它也是某些杀虫剂和植物生长调节剂的合成原料。实验室中常用于有机合成教学实验，演示酯化反应和亲核取代反应机制。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处 (2-8°C)，避免光照和潮湿环境。开封后需充惰性气体保护以延长保质期。使用时应在通风橱中操作，避免直接吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试表明其易溶于氯仿、乙酸乙酯等有机溶剂，微溶于水，配制溶液时需选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 数据显示其具有

轻微刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触眼睛，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置应遵守当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。

注：以上信息基于现有实验数据，具体应用需根据用户需求进一步验证。