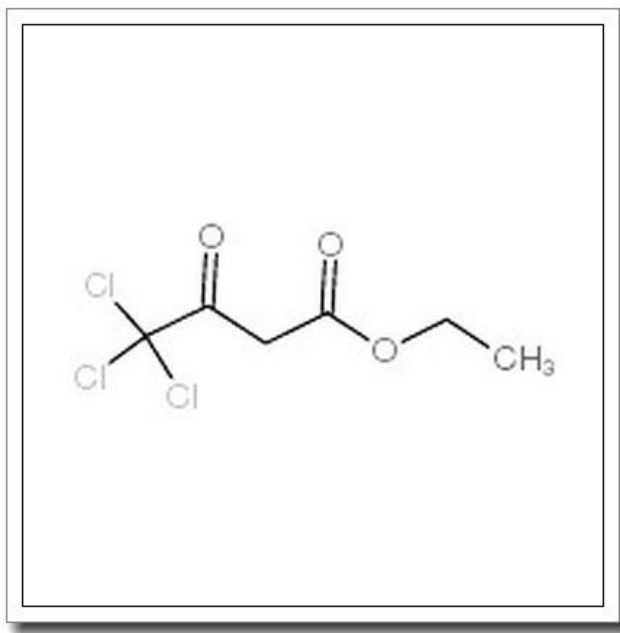


4,4,4-三氯乙酰乙酸乙酯

Ethyl 4,4,4-Trichloroacetoacetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4,4,4-Trichloroacetoacetate
中文名称	4,4,4-三氯乙酰乙酸乙酯
CAS 号	3702-98-5
分子式	C ₆ H ₇ Cl ₃ O ₃
分子量	233.477
纯度	>96%

产品说明

4, 4, 4-三氯乙酰乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4, 4, 4-三氯乙酰乙酸乙酯 (Ethyl 4, 4, 4-Trichloroacetoacetate) 是一种重要的有机合成中间体, 化学式为 $C_6H_7Cl_3O_3$, 分子量 233. 477。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有酯类特征气味, CAS 号为 3702-98-5。其结构中含有一个活性亚甲基和三个氯原子, 赋予其较高的反应活性。纯度标准 >96%, 适用于精细化工和药物合成领域。

2. 生物化学功能与重要性

作为乙酰乙酸乙酯的衍生物, 该化合物在生物化学中主要用于构建含三氯甲基的杂环结构。其 α -氢的酸性使其易于参与缩合、烷基化和环化反应, 是合成抗生素、杀虫剂及抗肿瘤药物前体的关键砌块。三氯甲基的引入可显著增强产物的脂溶性和生物活性。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品是合成抗疟疾药物氯喹和抗真菌剂的重要中间体。农药工业中用于制备三氯甲基吡啶类杀虫剂。此外, 在染料合成和特种高分子材料交联剂生产中也有广泛应用。实验室中常用于研究亲核取代反应机理。

4. 储存条件与使用建议

需密闭保存于阴凉干燥处, 推荐温度 2-8°C, 避免光照和潮湿环境。开封后建议充氮保护以延长稳定性。操作时应佩戴化学防护手套和护目镜, 在通风橱中进行称量。与强氧化剂、强碱需严格隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 批次间差异 <1%。MSDS 显示其为刺激性物质, 皮肤接触可能引起红肿, 误食需立即就医。运输分类为 UN3265, 腐蚀性液体。废弃物处理需符合当地环保法规, 建议采用专业化学品回收公司处置。

注：本说明基于当前研究数据，具体应用需结合实验条件验证。技术参数可能随生产工艺优化调整，请以最新质检报告为准。