

3-(2,3-二氢苯并呋喃-5-基)丙酸乙酯

Ethyl 3-(2,3-Dihydrobenzofuran-5-yl)propanoate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 3-(2,3-Dihydrobenzofuran-5-yl)propanoate
中文名称	3-(2,3-二氢苯并呋喃-5-基)丙酸乙酯
CAS 号	196597-66-7
分子式	C ₁₃ H ₁₆ O ₃
分子量	220.264
纯度	≥ 96%

产品说明

3-(2,3-二氢苯并呋喃-5-基)丙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 Ethyl 3-(2,3-Dihydrobenzofuran-5-yl)propanoate, CAS 号为 196597-66-7, 分子式为 C₁₃H₁₆O₃, 分子量为 220.264。外观为无色至淡黄色透明液体, 具有特征性酯类气味。其纯度 ≥96%, 密度约为 1.1 g/cm³, 沸点介于 280-285° C, 闪点高于 110° C。该化合物结构包含二氢苯并呋喃环与丙酸乙酯侧链, 兼具芳香性和酯类反应活性, 易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和氯仿, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并呋喃类衍生物, 该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体。其结构中的二氢苯并呋喃核心常见于药物先导化合物, 赋予其潜在的抗氧化、抗炎及神经调节特性。酯基部分可通过水解或转酯化反应进一步修饰, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域, 特别适用于以下场景:

- 作为非甾体抗炎药 (NSAIDs) 或抗抑郁药物的合成前体
- 用于构建天然产物类似物, 如香豆素或黄酮类衍生物
- 在有机合成中作为手性砌块或保护基载体
- 功能材料开发中用于制备光敏聚合物或液晶材料

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于阴凉干燥处, 建议温度 2-8° C, 避光保存。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜及实验服, 在通风橱中操作。避免与强氧化剂、强酸强碱接触, 防止酯键水解。运输时按一般化学品规范处理。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 水分含量 ≤0.5%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安

全数据表明: LD50 (大鼠经口) >2000 mg/kg, 属于低毒类物质, 但可能引起眼睛和皮肤刺激。如接触皮肤, 立即用肥皂水冲洗; 若误入眼睛, 用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地环保法规, 建议通过专业化学品回收机构处理。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件进一步验证。)