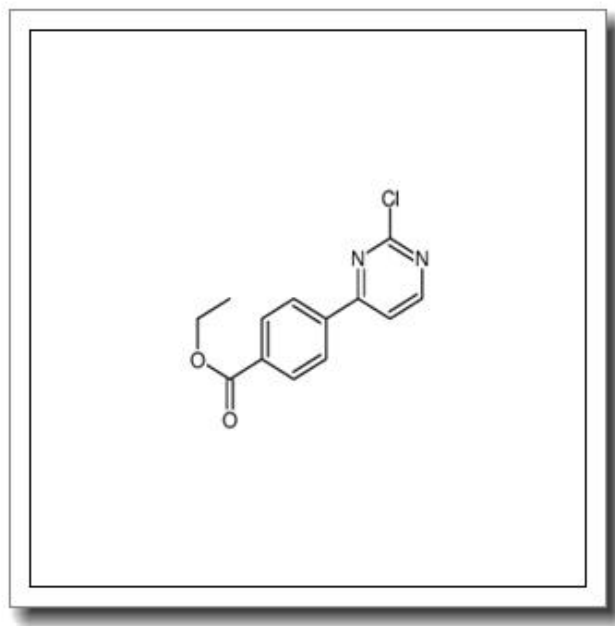


4-(2-氯嘧啶-4-基)苯甲酸乙酯

Ethyl 4-(2-chloro-4-pyrimidinyl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4-(2-chloro-4-pyrimidinyl)benzoate
中文名称	4-(2-氯嘧啶-4-基)苯甲酸乙酯
CAS 号	499195-60-7
分子式	C ₁₃ H ₁₁ ClN ₂ O ₂
分子量	262.692
纯度	≥96%

产品说明

4-(2-氯嘧啶-4-基)苯甲酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(2-氯嘧啶-4-基)苯甲酸乙酯 (Ethyl 4-(2-chloro-4-pyrimidinyl)benzoate) 是一种有机合成中间体，化学式为 $C_{13}H_{11}ClN_2O_2$ ，分子量 262.692，CAS 号 499195-60-7。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有嘧啶环和苯甲酸酯的结构特征，可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和乙腈，微溶于水。其结构中 2-氯嘧啶基团赋予其较高的反应活性，是医药和农药合成中的重要砌块。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶衍生物，可通过亲核取代反应进一步修饰嘧啶环上的氯原子，或通过酯水解反应转化为羧酸衍生物。其在药物化学中常用于构建激酶抑制剂的核心骨架，尤其是针对 EGFR、VEGFR 等靶点的抗癌药物研发。此外，氯原子的存在使其成为 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应的理想底物。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- (1) 医药中间体：用于合成抗肿瘤、抗病毒及抗炎药物的活性分子，如酪氨酸激酶抑制剂的前体化合物。
- (2) 农药研发：作为杀菌剂或除草剂的嘧啶类结构单元。
- (3) 材料科学：参与制备液晶材料或光电功能分子的合成。
- (4) 学术研究：作为有机合成方法学研究的模型底物。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8℃ 冷藏保存。长期储存需充入惰性气体（如氮气）保护。使用时应在通风橱中操作，避免直接接触皮肤和眼睛。溶解性测试表明，推荐使用 DMSO 配制母液（浓度 ≤ 50 mM），后续可用缓冲液稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 USP 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为大鼠经口 >500 mg/kg，属于刺激性化学品。操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，建议通过专业危废处理公司回收。

（注：本说明基于现有实验数据编写，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）