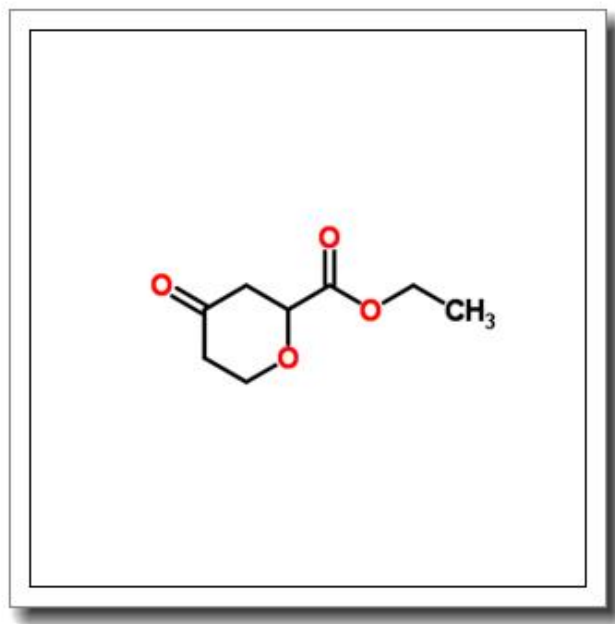


# 4-氧代四氢-2H-吡喃-2-羧酸乙酯

*ethyl 4-oxooxane-2-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-oxooxane-2-carboxylate
中文名称	4-氧代四氢-2H-吡喃-2-羧酸乙酯
CAS 号	287193-07-1
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>
分子量	172.178
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为 4-氧代四氢-2H-吡喃-2-羧酸乙酯 (ethyl 4-oxooxane-2-carboxylate), 化学式为 C<sub>8</sub>H<sub>12</sub>O<sub>4</sub>, 分子量 172.178, CAS 号 287193-07-1。外观通常为无色至淡黄色透明液体, 具有酯类特征气味。其结构中含四氢吡喃环与酯基, 羰基 (C=O) 位于环的 4 位, 赋予分子较高的反应活性。纯度 ≥96%, 杂质主要为同系物或合成副产物。该化合物易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮, 微溶于水, 需避光保存以防分解。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为氧代四氢吡喃衍生物, 该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体。其环状结构可模拟天然产物骨架, 广泛应用于药物化学中杂环化合物的构建。羰基与酯基的协同作用使其成为亲核试剂 (如格氏试剂) 的优良受体, 也可通过还原反应转化为羟基或亚甲基衍生物, 在结构修饰中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

医药领域: 用于抗病毒药物、抗炎剂及中枢神经系统药物前体的合成, 如作为 HIV 蛋白酶抑制剂的中间体。

材料科学: 参与制备功能性高分子单体, 改善材料的热稳定性或光学性能。

农业化学: 衍生为杀虫剂或植物生长调节剂的活性成分。

研究用途: 在有机方法学开发中作为模板分子, 研究环状酮酯类化合物的反应机理。

### 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 2-8°C), 避免与强氧化剂、酸碱接触。运输时需防震、防泄漏。使用前建议氮气保护下取样, 惰性气氛中进行敏感反应。实验室操作需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 确保通风良好。

### 5. 质量控制与安全信息

质量控制采用 HPLC 检测纯度, GC-MS 确认结构。安全数据: LD<sub>50</sub> (大鼠经口) 未明确, 但对皮肤和眼睛有刺激性 (GHS 分类: Category 2)。泄漏处理需用惰性吸

附材料吸收，废液按危险有机废物处置。急救措施：皮肤接触时立即用肥皂水冲洗，误食需就医洗胃。

（注：实际应用中请以最新版物质安全数据表 MSDS 为准）