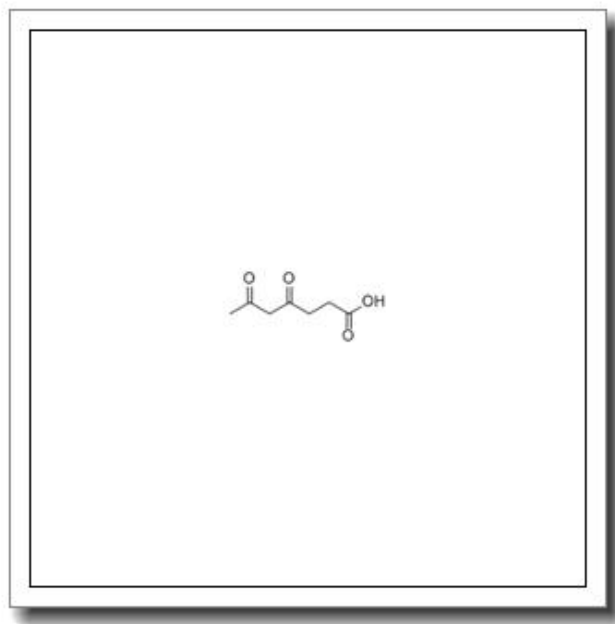


# 4,6-二氧代庚酸

*4,6-dioxoheptanoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4,6-dioxoheptanoic acid
中文名称	4,6-二氧代庚酸
CAS 号	51568-18-4
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>
分子量	158.152
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 4,6-二氧代庚酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4,6-二氧代庚酸 (4,6-dioxoheptanoic acid) 是一种具有  $\beta$ -二酮结构的有机羧酸，化学式为  $C_7H_{10}O_4$ ，分子量 158.152，CAS 登记号 51568-18-4。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度  $\geq 96\%$ ，易溶于极性有机溶剂（如甲醇、乙醇），微溶于水。其分子中的 4,6-二羰基结构赋予其独特的化学活性，可作为合成中间体参与多种缩合与环化反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是脂肪酸代谢途径的模拟物，其  $\beta$ -二酮基团能够螯合金属离子，在酶抑制研究中具有潜在价值。作为酮体衍生物，可用于模拟病理状态下（如糖尿病）的代谢中间产物，或作为合成生物活性分子（如抗生素、激素类似物）的关键砌块。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于制备抗炎药物前体或蛋白酶抑制剂；在材料科学中，可作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的合成。此外，其衍生物在农用化学品（如植物生长调节剂）和精细化工（香料合成）中亦有应用。典型实验场景包括：体外酶活性测定、有机合成中的 Michael 加成反应底物。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}\text{C}$  干燥环境中，避免光照与潮湿。开封后需充惰性气体保护，以防止氧化降解。使用前需恢复至室温平衡，称量时建议在干燥环境下操作。溶解性测试表明，配制成 10 mM DMSO 储备液时可稳定保存 3 个月 ( $-80^{\circ}\text{C}$ )。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (UV 254 nm) 检测纯度，批间差异  $< 2\%$ 。产品含微量水分 ( $\leq 0.5\%$ ，卡尔费休法)，使用前无需额外纯化。安全数据：急性毒性 (LD50 大鼠口服)  $> 2000$  mg/kg，但接触皮肤或粘膜可能引发刺激。操作时需佩戴防护手套及护目镜，废弃物应作为有害化学品处理。

(注: 本说明基于现有研究数据, 具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。)