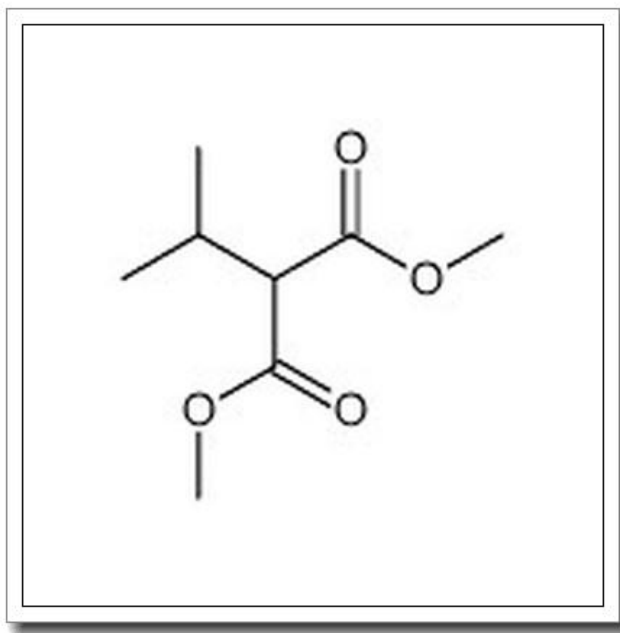


2-羧基甲氧基-3-甲基丁酸甲酯

dimethyl 2-propan-2-ylpropanedioate



产品基本信息

属性	值
化学名称	dimethyl 2-propan-2-ylpropanedioate
中文名称	2-羧基甲氧基-3-甲基丁酸甲酯
CAS 号	51122-91-9
分子式	C ₈ H ₁₄ O ₄
分子量	174.194
纯度	>96%

产品说明

2-羰基甲氧基-3-甲基丁酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-羰基甲氧基-3-甲基丁酸甲酯 (dimethyl 2-propan-2-ylpropanedioate, CAS 号 51122-91-9) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_8H_{14}O_4$, 分子量 174.194。本品为无色至淡黄色液体, 具有酯类特征气味, 密度约为 1.05 g/cm^3 , 沸点范围 $210\text{-}215^\circ \text{C}$ 。其结构中包含活性羰基和酯基, 易参与缩合、酯交换等反应, 在非极性溶剂中溶解性良好。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为丙二酸酯衍生物, 是合成多种生物活性分子的关键中间体。其 α -位活泼氢可发生去质子化, 与醛酮类发生 Knoevenagel 缩合反应, 广泛应用于杂环化合物及药物分子骨架构建。在酶抑制剂和手性助剂合成中具有特殊价值, 尤其适用于构建含季碳中心的结构单元。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于三个领域:

- 3.1 医药中间体: 用于合成非甾体抗炎药、抗病毒药物及心血管疾病治疗剂的侧链结构。
- 3.2 材料科学: 作为改性单体参与聚合物合成, 改善材料柔韧性与热稳定性。
- 3.3 精细化工: 用于制备香料固定剂和光引发剂, 在 UV 固化涂料中表现优异。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氮气) 保护的密闭容器中, 温度控制在 $2\text{-}8^\circ \text{C}$ 避光保存。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。使用时应佩戴丁腈手套和护目镜, 在通风橱中操作。与强氧化剂、强酸强碱需隔离存放。

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, 但接触皮肤可能引起轻微刺激。泄漏处理需用惰性吸附材料收集, 废液按危险化学品规范处置。

(注: 本说明基于当前研究数据, 具体应用需结合实验验证。技术参数可能因批次略有差异, 请以随货 COA 为准。)