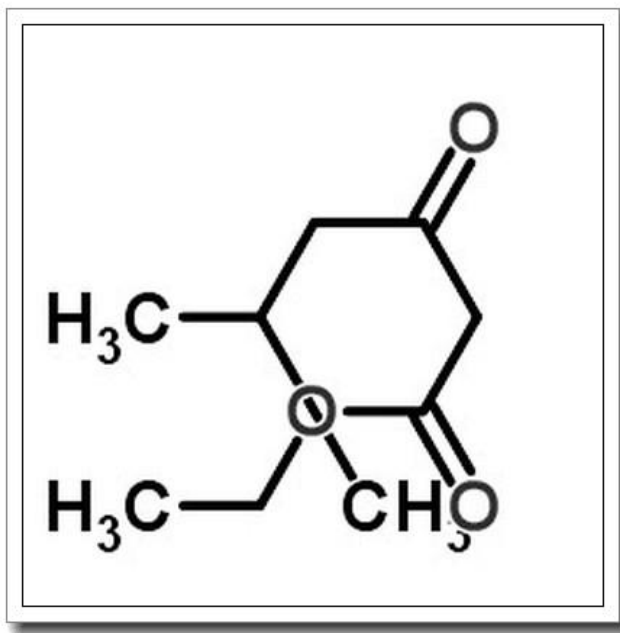


5-甲基-3-羰基己酸乙酯

ethyl 5-methyl-3-oxohexanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 5-methyl-3-oxohexanoate
中文名称	5-甲基-3-羰基己酸乙酯
CAS 号	34036-16-3
分子式	C ₉ H ₁₆ O ₃
分子量	172.221
纯度	>96%

产品说明

5-甲基-3-羰基己酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲基-3-羰基己酸乙酯 (ethyl 5-methyl-3-oxohexanoate, CAS 号 34036-16-3) 是一种重要的有机酯类化合物, 分子式为 $C_9H_{16}O_3$, 分子量 172.221。本品为无色至淡黄色透明液体, 具有典型的酯类气味, 沸点约为 $210-215^{\circ}C$, 密度 $1.01-1.03 g/cm^3$ ($25^{\circ}C$)。其结构中包含 β -酮酯官能团, 使其兼具酮和酯的化学特性, 易参与缩合、烷基化等反应。产品纯度 $\geq 96\%$, 杂质主要为同系物及微量水分。

2. 生物化学功能与重要性

作为 β -酮酯衍生物, 该化合物在生物化学中常作为合成中间体, 尤其适用于类固醇、萜类及前列腺素等天然产物的结构构建。其 β -羰基的活泼氢使其成为 Michael 加成、Claisen 缩合等关键反应的理想底物, 在酶催化反应中也可作为酰基供体。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品是合成抗炎药物、激素类药物 (如皮质醇类似物) 的重要前体。香料工业中用于调配果香型香精, 赋予青苹果、菠萝等风味特征。此外, 在农药化学中可用于拟除虫菊酯类杀虫剂的合成。实验室中常用作不对称合成的手性砌块, 或用于金属有机催化反应研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于阴凉干燥处 ($2-8^{\circ}C$), 避免光照与湿气。开封后需充氮保护以延长保质期 (通常 24 个月)。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。与强氧化剂、强碱需隔离存放。溶解性测试表明易溶于乙醇、乙醚, 微溶于水 ($<0.1 g/100 mL$)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 GC-MS 和 HPLC 双重检测, 确保杂质总量 $<4\%$ 。安全数据 (SDS) 显示其 LD50 (大鼠经口) 为 $3200 mg/kg$, 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（如硅藻土）覆盖，废液按危险有机废物处置。运输分类为 UN 1993/PG III。

注：具体实验条件请参阅最新文献方法，批量采购可提供定制纯度方案（98%-99.5%）。