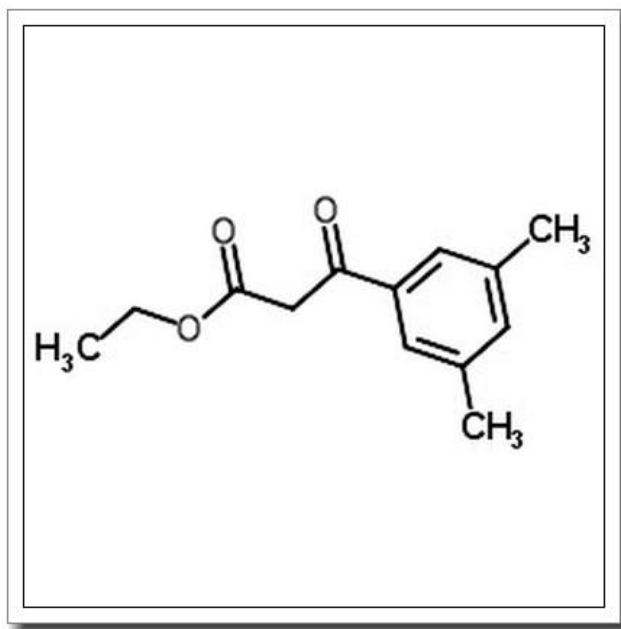


Ethyl 3-(3,5-dimethylphenyl)-3-oxopropanoate

Ethyl 3-(3,5-dimethylphenyl)-3-oxopropanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 3-(3,5-dimethylphenyl)-3-oxopropanoate
中文名称	Ethyl 3-(3,5-dimethylphenyl)-3-oxopropanoate
CAS 号	871129-46-3
分子式	C ₁₃ H ₁₆ O ₃
分子量	220.264
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

Ethyl 3-(3,5-dimethylphenyl)-3-oxopropanoate 是一种有机化合物，化学式为 C₁₃H₁₆O₃，分子量为 220.264。该化合物属于 β-酮酸酯类，其结构中包含一个 3,5-二甲基苯基和一个乙酯基团。CAS 号为 871129-46-3，纯度通常高于 96%。该物质在常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体，具有典型的酯类气味，可溶于常见有机溶剂如乙醇、乙醚和二氯甲烷，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为一种 β-酮酸酯衍生物，该化合物在有机合成中具有重要的中间体功能。其结构中的活性亚甲基和羰基使其能够参与多种反应，如克莱森缩合、迈克尔加成和环化反应。在药物化学和材料科学领域，它是构建复杂分子骨架的关键前体，尤其适用于合成具有生物活性的杂环化合物或功能化芳香族衍生物。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、农药合成和精细化工领域。在医药领域，它可作为非甾体抗炎药或抗菌药物的合成中间体。在农药工业中，用于制备具有杀虫或除草活性的分子。此外，在材料科学中，它可用于合成高分子单体或功能性材料的前驱体。实验室中也可作为标准品或对照品用于分析方法开发和质量控制。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于阴凉、干燥、通风良好的环境中，远离热源和明火。理想储存温度为 2-8°C，长期保存需充惰性气体保护。使用时应佩戴适当的个人防护装备，包括化学护目镜、手套和实验服。操作区域应具备良好的通风条件，避免吸入蒸气或接触皮肤。开封后建议尽快使用，剩余产品需严格密封。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保纯度 >96%。杂质主要包括未反应的原料和可能的同系物。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时需遵循 GHS 标准，分类为刺激性物质（类别 2）。如发生接

触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废物处理机构处置。