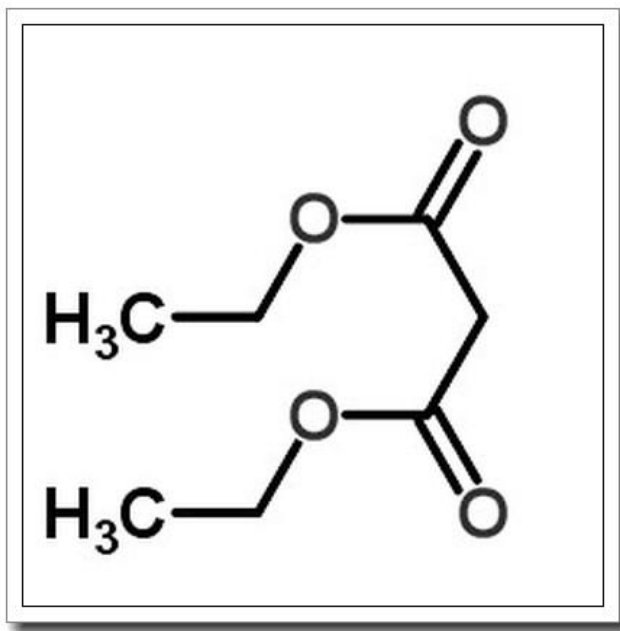


丙二酸二乙酯

Diethyl malonate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Diethyl malonate
中文名称	丙二酸二乙酯
CAS 号	105-53-3
分子式	C ₇ H ₁₂ O ₄
分子量	160.168
纯度	>96%

产品说明

丙二酸二乙酯 (Diethyl malonate) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

丙二酸二乙酯 (CAS 号: 105-53-3) 是一种重要的有机化合物, 分子式为 $C_7H_{12}O_4$, 分子量为 160.168。本品为无色至淡黄色透明液体, 具有特征性酯类香气, 沸点约 $199^{\circ}C$, 密度 1.055 g/cm^3 ($20^{\circ}C$), 易溶于乙醇、乙醚等有机溶剂, 微溶于水。其化学结构中的活性亚甲基和酯基赋予其优异的反应活性, 广泛应用于有机合成领域。本产品纯度 $>96\%$, 符合工业级和实验室级标准。

2. 生物化学功能与重要性

作为丙二酸的二乙酯衍生物, 该化合物在生物化学中充当羧酸酯酶的作用底物, 常用于酶活性研究。其亚甲基氢的酸性 ($pK_a \approx 13$) 使其成为重要的碳负离子前体, 在 Michael 加成、Knoevenagel 缩合等反应中发挥关键作用。此外, 它是合成巴比妥酸盐类药物的关键中间体, 在药物化学领域具有不可替代的地位。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药工业中, 本品用于合成维生素 B1、磺胺类药物及抗疟疾化合物氯喹的中间体。农药领域用于制备杀虫剂和除草剂 (如马拉松)。香料工业中作为合成环状麝香类香料的原料。在材料科学领域, 可作为高分子材料改性剂和锂电池电解液添加剂。实验室中常用作有机合成试剂, 特别是用于构建碳-碳键的缩合反应。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于阴凉 ($<30^{\circ}C$)、干燥、通风良好的环境中, 远离火源和氧化剂。使用原装密闭容器保存, 避免与强酸、强碱接触。操作时需佩戴化学防护手套、护目镜, 在通风橱中进行。若需长期储存 (>6 个月), 建议充氮保护以防止氧化变质。开封后应尽快使用完毕, 残余物料需严格密封。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 GC-MS 和 HPLC 双重检测, 确保杂质含量 $<4\%$ 。主要检测指标包括水分 ($\leq 0.1\%$)、酸值 ($\leq 0.5\text{ mg KOH/g}$) 和折光率 ($n_{20/D} 1.413-1.415$)。安全数

据: LD50 (大鼠经口) >5000 mg/kg, 属于低毒类物质, 但接触皮肤可能引起轻微刺激。若不慎接触眼睛, 应立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃处置需符合当地环保法规, 建议通过专业化学品回收机构处理。

(注: 本说明基于当前科学认知, 具体应用需结合实验条件调整。产品规格可能因批次略有差异, 以实际 COA 为准。)