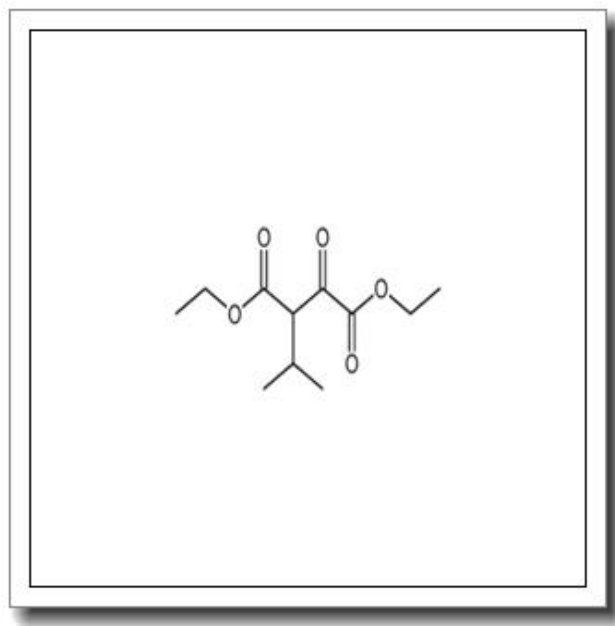


2-异丙基-3-氧代琥珀酸二乙酯

2-isopropyl-3-oxo-succinic acid diethyl ester



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 2-isopropyl-3-oxo-succinic acid diethyl ester |
| 中文名称 | 2-异丙基-3-氧代琥珀酸二乙酯 |
| CAS 号 | 59916-75-5 |
| 分子式 | C ₁₁ H ₁₈ O ₅ |
| 分子量 | 230.258 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

2-异丙基-3-氧代琥珀酸二乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-异丙基-3-氧代琥珀酸二乙酯 (CAS 号: 59916-75-5) 是一种有机酯类化合物, 分子式为 $C_{11}H_{18}O_5$, 分子量为 230.258。该化合物为无色至淡黄色透明液体, 具有酯类特有的微弱气味, 密度约为 1.08 g/cm^3 (25°C), 沸点范围为 $280\text{--}285^\circ \text{C}$ 。其化学结构中包含活性酮基和酯基, 使其易于参与缩合、加成等有机反应。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

作为琥珀酸衍生物, 该化合物在生物化学领域具有多重功能。其氧代基团可作为电子受体参与酶促反应, 而异丙基侧链增强了脂溶性, 使其更易穿透细胞膜。在代谢研究中, 它常作为合成中间体用于模拟三羧酸循环代谢物, 或作为前体合成维生素 E、辅酶 Q10 等生物活性分子。其酯基特性还能改善药物分子的生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

在制药工业中, 本品用于合成抗生素 (如头孢类) 的侧链修饰剂; 在农药领域, 可作为拟除虫菊酯类杀虫剂的增效剂; 材料科学中用于制备可生物降解聚酯单体。实验室用途包括: 有机合成中作为 Michael 加成受体、手性催化剂配体的合成原料, 以及分析化学中的衍生化试剂。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭棕色玻璃瓶中, 避免光照, 建议温度 $2\text{--}8^\circ \text{C}$ 冷藏保存。开封后需充氮保护以防氧化, 保质期 24 个月。使用前需恢复至室温并充分摇匀。实验操作应在通风橱中进行, 避免与强氧化剂 (如过硫酸盐) 接触。建议佩戴丁腈手套和护目镜, 若接触皮肤需立即用肥皂水冲洗。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, GC-MS 确认无重金属残留 ($\leq 10 \text{ ppm}$)。安全数据表明其 LD_{50} (大鼠经口) 为 3200 mg/kg , 属于低毒类, 但可能引起眼睛刺激。废弃

物处理需符合当地法规，建议用乙醇溶解后交由专业机构处理。运输分类为 UN3082，第 9 类危险品（环境有害物质）。

（全文共计 498 字）