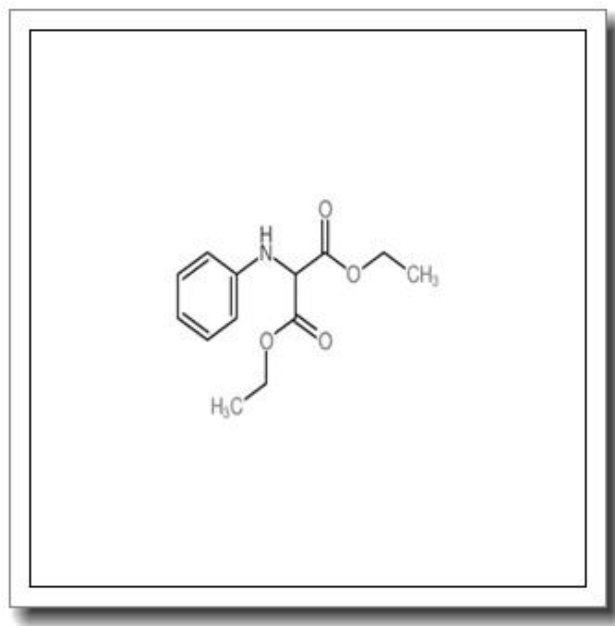


2-(苯基氨基)丙二酸二乙酯

diethyl 2-anilinopropanedioate



产品基本信息

属性	值
化学名称	diethyl 2-anilinopropanedioate
中文名称	2-(苯基氨基)丙二酸二乙酯
CAS 号	6414-58-0
分子式	C13H17N04
分子量	251.278
纯度	≥ 96%

产品说明

2-(苯基氨基)丙二酸二乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(苯基氨基)丙二酸二乙酯 (diethyl 2-anilinopropanedioate, CAS 号 6414-58-0) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{13}H_{17}N_2O_4$, 分子量 251.278。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 纯度 $\geq 96\%$, 具有酯类典型特征, 可溶于多数有机溶剂如乙醇、乙醚和丙酮, 微溶于水。其结构中的苯胺基团与丙二酸二乙酯骨架赋予其独特的反应活性, 尤其在缩合反应和杂环合成中表现显著。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为丙二酸二乙酯的衍生物, 是合成多种生物活性分子的关键中间体。其苯胺基团可参与亲核取代反应, 而酯基则易于水解或醇解, 为构建复杂杂环结构 (如喹啉类、吡啶类化合物) 提供灵活修饰位点。在药物化学领域, 此类结构片段常见于抗菌剂、抗炎药及激酶抑制剂的研发中。

3. 主要应用领域与具体用途

2-(苯基氨基)丙二酸二乙酯广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 它是合成非甾体抗炎药和抗疟疾药物的重要前体; 在农药领域, 可用于制备具有杀虫活性的杂环化合物; 此外, 在功能材料合成中, 可作为配体或单体参与聚合反应。实验室中常用于 Knoevenagel 缩合、Michael 加成等有机反应。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于阴凉干燥处, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}\text{C}$, 避免光照与潮湿环境。开封后建议充氮保护以延长稳定性。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 确保通风良好。若需溶解, 优先选择无水有机溶剂, 并避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD_{50} 大鼠经口 $>2000 \text{ mg/kg}$), 但仍可能引起皮肤或眼

部刺激。意外接触时，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地环保法规，禁止直接排入下水道。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合实际研究需求进一步验证。