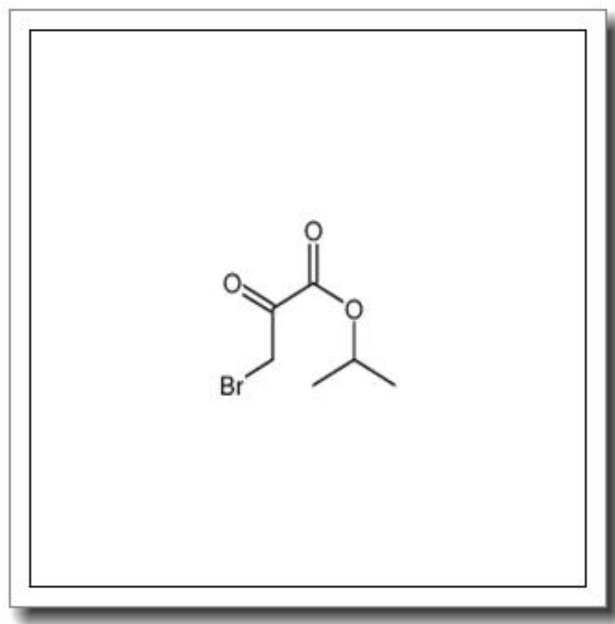


3-溴-2-氧代丙酸异丙酯

propan-2-yl 3-bromo-2-oxopropanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	propan-2-yl 3-bromo-2-oxopropanoate
中文名称	3-溴-2-氧代丙酸异丙酯
CAS 号	56417-63-1
分子式	C ₆ H ₉ BrO ₃
分子量	209.038
纯度	≥96%

产品说明

3-溴-2-氧代丙酸异丙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-2-氧代丙酸异丙酯 (Propan-2-yl 3-bromo-2-oxopropanoate) 是一种有机溴化合物, 化学式为 $C_6H_9BrO_3$, 分子量 209.038, CAS 号 56417-63-1。本品为无色至淡黄色液体, 纯度 $\geq 96\%$, 具有酯类典型气味, 易溶于有机溶剂如乙醇、乙醚和丙酮, 微溶于水。其结构中的溴原子和 α -酮酯基团赋予其高反应活性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的有机合成中间体, 其 α -溴代酮结构可参与亲核取代、缩合反应及金属催化偶联反应。在生物化学领域, 类似结构的溴代酯常用于修饰蛋白质或核酸, 作为探针或交联剂。其活性位点也为药物分子设计提供关键骨架, 尤其在抗肿瘤和抗菌先导化合物开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

3-溴-2-氧代丙酸异丙酯广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 用于合成 β -酮酸衍生物及杂环化合物; 在农药领域, 作为杀虫剂和除草剂的中间体; 在材料科学中, 可参与聚合物改性或功能单体合成。实验室中常用于构建 C-C 键或 C-Br 键的模型反应研究。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于 2-8°C 干燥环境中, 远离氧化剂和强碱。开封后建议充氮保护以延长稳定性。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套、护目镜及防护服, 避免吸入蒸气或接触皮肤。若意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。

5. 质量控制与安全信息

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, 该物质对眼睛和皮肤有刺激性, 可能引起呼吸道过敏。运输分类为 UN 1993

（易燃液体），须按危险化学品规范储运。废弃物处理需遵循当地环保法规，禁止直接排放。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展安全评估。）