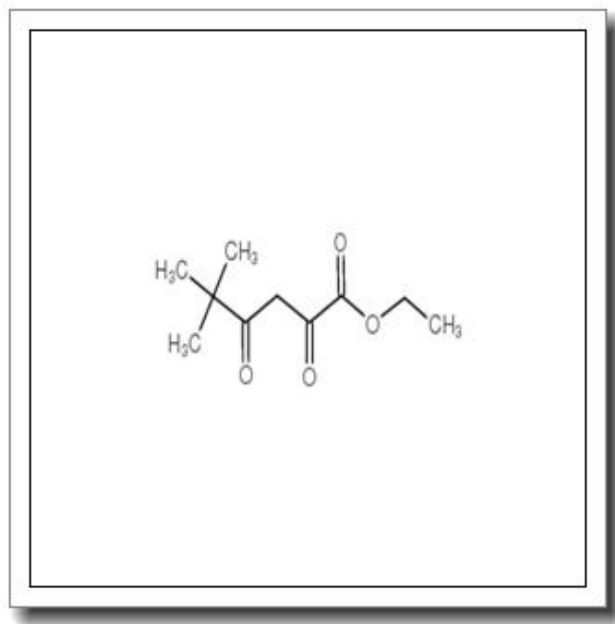


三甲基乙酰基丙酮酸乙酯

Ethyl 5,5-dimethyl-2,4-dioxohexanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5,5-dimethyl-2,4-dioxohexanoate
中文名称	三甲基乙酰基丙酮酸乙酯
CAS 号	13395-36-3
分子式	C ₁₀ H ₁₆ O ₄
分子量	200.232
纯度	≥96%

产品说明

5, 5-二甲基-2, 4-二氧代己酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5, 5-二甲基-2, 4-二氧代己酸乙酯 (Ethyl 5, 5-dimethyl-2, 4-dioxohexanoate) 是一种有机酯类化合物, 化学式为 $C_{10}H_{16}O_4$, 分子量 200. 232, CAS 号为 13395-36-3。本品为无色至淡黄色透明液体, 具有酯类特征性气味, 密度约为 1.05 g/cm^3 (25°C), 沸点介于 $210\text{--}215^\circ\text{C}$ 。其结构中包含 β -二酮和酯基官能团, 赋予其良好的反应活性和配位能力。产品纯度 $\geq 96\%$, 需避光密封保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为 β -二酮衍生物, 在金属离子螯合和有机合成中具有重要作用。其烯醇式结构可与过渡金属 (如铜、铁) 形成稳定络合物, 广泛应用于催化剂设计和生物酶模拟研究。在代谢途径研究中, 可作为类似物用于探究酮体代谢机制。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药中间体: 用于合成喹诺酮类抗生素及抗肿瘤药物前体。
- 3.2 材料科学: 作为交联剂参与高分子材料改性, 提升聚合物热稳定性。
- 3.3 分析化学: 作为 GC-MS 内标物和金属离子检测探针。
- 3.4 农业化学: 用于新型杀虫剂和植物生长调节剂的研发。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氮气) 保护的密闭容器中, 温度控制在 $2\text{--}8^\circ\text{C}$, 相对湿度 $\leq 60\%$ 。开封后建议充氮保存并于 6 个月内使用完毕。操作时需佩戴化学防护手套、护目镜及防毒面具, 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 $\leq 0.5\%$, 重金属残留 $\leq 10 \text{ ppm}$ 。安全数据表明其具有刺激性 (GHS 分类: Xi), 接触皮肤后应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规, 建议通过专业机构进行焚化处理。

(注: 本说明书基于当前研究数据编制, 具体应用需结合实验条件调整。更多技术参数可索取 COA 报告。)