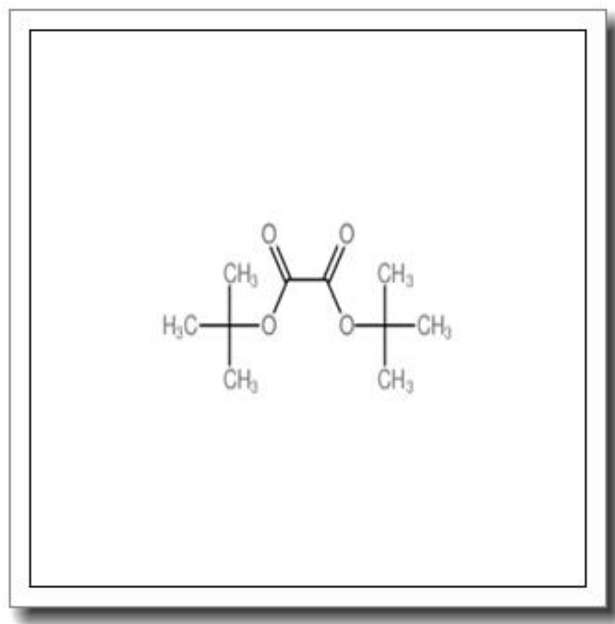


二叔丁基草酸酯

ditert-butyl oxalate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ditert-butyl oxalate
中文名称	二叔丁基草酸酯
CAS 号	691-64-5
分子式	C ₁₀ H ₁₈ O ₄
分子量	202.248
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

二叔丁基草酸酯 (ditert-butyl oxalate, CAS 号: 691-64-5) 是一种有机草酸酯类化合物, 分子式为 $C_{10}H_{18}O_4$, 分子量为 202.248。该化合物由两个叔丁基基团与草酸酯化形成, 常温下通常为无色至淡黄色液体或低熔点固体。其纯度通常 $\geq 96\%$, 具有较高的化学稳定性, 但在强酸或强碱条件下可能发生水解反应。二叔丁基草酸酯易溶于有机溶剂 (如乙醇、乙醚、丙酮等), 但不溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

二叔丁基草酸酯在有机合成中作为重要的草酰化试剂, 能够高效引入草酸酯基团。其叔丁基结构赋予其良好的空间位阻效应, 使其在选择性反应中表现出独特优势。此外, 该化合物可作为保护基团前体或中间体, 参与复杂分子的构建, 尤其在药物合成和精细化学品制备中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 常用于合成抗生素、抗肿瘤药物及心血管药物的中间体。在农药领域, 可作为除草剂或杀菌剂的合成原料。此外, 二叔丁基草酸酯还可用于高分子材料的改性, 如作为交联剂或功能单体, 提升材料性能。

4. 储存条件与使用建议

建议将二叔丁基草酸酯密封保存于阴凉、干燥、通风良好的环境中, 避免阳光直射和高温。储存温度应控制在 $2-8^{\circ}C$ 以延长保质期。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强氧化剂、强酸或强碱接触。实验人员应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 确保操作环境通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 GC 分析确保纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质量分析证书 (COA)。二叔丁基草酸酯对眼睛、皮肤和呼吸道有轻微刺激性, 接触后应立即用大量清水冲

洗，必要时就医。废弃处理需遵循当地环保法规，不可直接排入下水道。运输时需贴有腐蚀性化学品标签，并避免与不相容物质混装。