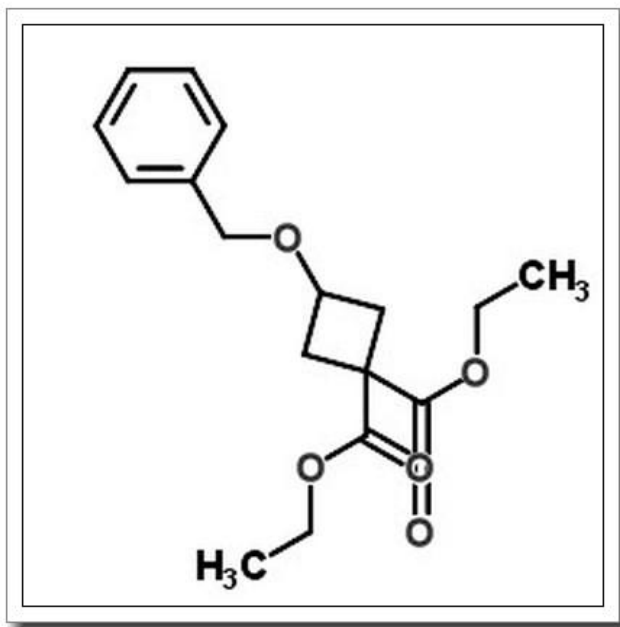


## 3-苄氧基环丁烷-1,1-二甲酸二乙酯

*diethyl 3-phenylmethoxycyclobutane-1,1-dicarboxylate*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	diethyl 3-phenylmethoxycyclobutane-1,1-dicarboxylate
中文名称	3-苄氧基环丁烷-1,1-二甲酸二乙酯
CAS 号	54166-15-3
分子式	C17H22O5
分子量	306.354
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-苄氧基环丁烷-1,1-二甲酸二乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 diethyl 3-phenylmethoxycyclobutane-1,1-dicarboxylate, CAS 号 54166-15-3, 分子式 C<sub>17</sub>H<sub>22</sub>O<sub>5</sub>, 分子量 306.354, 是一种高纯度 (>96%) 的环丁烷衍生物。其结构特征为环丁烷骨架 1,1 位被二甲酸乙酯基团取代, 3 位连接苄氧基团, 赋予其独特的空间位阻和反应活性。常温下为无色至淡黄色液体, 易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和氯仿, 不溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多功能合成砌块, 其环丁烷结构可参与环加成、开环等反应, 而酯基和苄氧基提供了进一步修饰的位点。在药物化学中, 环丁烷骨架常用于模拟刚性构象, 增强靶标结合能力; 在材料科学中, 可作为交联剂或单体用于高分子合成。其高反应性和结构可调性使其在复杂分子构建中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

医药中间体: 用于合成抗肿瘤、抗病毒药物的环丁烷核心结构。

有机合成: 作为手性合成子参与不对称催化反应, 构建四元环体系。

材料科学: 用于开发光敏树脂或功能性聚合物的交联剂。

研究领域: 在机理研究中作为探针分子, 探索环丁烷类化合物的反应动力学。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C 至 4° C 的密闭容器中, 避光防潮, 惰性气体 (如氮气) 保护可延长稳定性。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套和护目镜。溶解推荐使用无水级有机溶剂, 反应体系中需严格除水以提高产率。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, GC-MS 验证无重金属残留。急性毒性数据 (LD<sub>50</sub> 大鼠口服) >2000 mg/kg, 属于低毒类化合物, 但接触皮肤可能引起轻微刺激。废弃物处

理需符合有机溶剂回收标准，避免直接排放。安全技术说明书（MSDS）备案，建议使用者预先进行风险评估（COSHH 标准）。

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床或食品领域。具体应用需结合实验方案调整工艺参数。