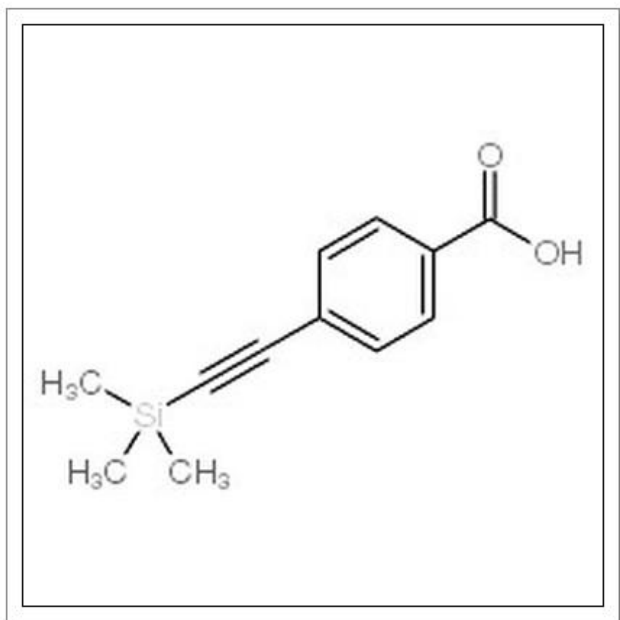


4-(三甲基硅烷乙炔基)苯甲酸

4-(2-trimethylsilylethynyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(2-trimethylsilylethynyl)benzoic acid
中文名称	4-(三甲基硅烷乙炔基)苯甲酸
CAS 号	16116-80-6
分子式	C ₁₂ H ₁₄ O ₂ Si
分子量	218.324
纯度	>96%

产品说明

4-(三甲基硅烷乙炔基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(三甲基硅烷乙炔基)苯甲酸 (CAS 号: 16116-80-6) 是一种含硅炔基的芳香羧酸衍生物, 分子式为 $C_{12}H_{14}O_2Si$, 分子量为 218.324。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的三甲基硅烷乙炔基与苯甲酸基团赋予其独特的化学性质, 包括良好的热稳定性和可修饰性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为中间体或功能化修饰基团。其炔基可通过点击化学 (如 CuAAC 反应) 与叠氮化合物高效结合, 而羧酸基团易于衍生化为酯、酰胺等活性形式。这种双重反应性使其成为蛋白质标记、药物偶联和材料科学中分子设计的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于小分子抑制剂或探针的合成, 特别是靶向蛋白的共价修饰。材料科学领域用于制备功能化聚合物或硅基复合材料。此外, 在荧光标记和生物成像领域, 其炔基可作为连接臂引入荧光团或其他报告分子。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气手套箱) 中操作, 避免与强氧化剂或酸碱直接接触。溶解性测试表明其易溶于 THF、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格验证纯度 ($>96\%$), 并提供批次相关 COA。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若接触皮肤, 立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地环保法规。

注：具体实验方案建议参考文献报道或咨询专业技术支持。本说明仅代表通用性指导，实际应用需根据用户工艺条件调整。