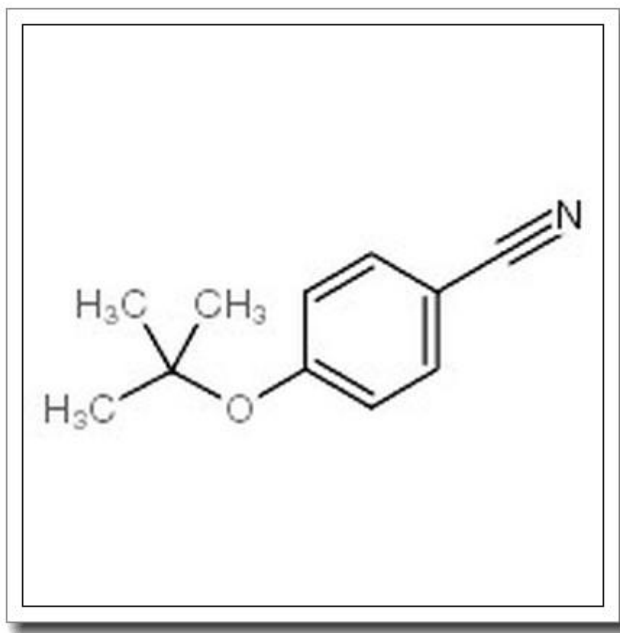


4-叔丁氧基苯甲腈

4-[(2-methylpropan-2-yl)oxy]benzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[(2-methylpropan-2-yl)oxy]benzotrile
中文名称	4-叔丁氧基苯甲腈
CAS 号	185259-36-3
分子式	C ₁₁ H ₁₃ N ₁ O
分子量	175.227
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-叔丁氧基苯甲腈 (4-[(2-methylpropan-2-yl)oxy]benzotrile) 是一种有机化合物, CAS 号为 185259-36-3, 分子式为 $C_{11}H_{13}NO$, 分子量为 175.227。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度高于 96%。其结构中含有叔丁氧基和苯甲腈基团, 具有较高的化学稳定性和疏水性, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二氯甲烷, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

4-叔丁氧基苯甲腈作为一种重要的中间体, 在有机合成和药物化学中具有广泛的应用价值。其苯甲腈基团可作为反应位点参与多种偶联和缩合反应, 而叔丁氧基则提供了空间位阻效应, 有助于调控反应的选择性。该化合物在构建复杂分子骨架和功能化修饰中表现出独特的优势, 尤其在医药和材料科学领域备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体、液晶材料和功能高分子材料的合成。在药物研发中, 它是合成抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物的重要前体。此外, 其衍生物可用于制备高性能液晶显示材料, 改善材料的介电性能和热稳定性。在科研领域, 4-叔丁氧基苯甲腈也常用于有机合成方法学研究和催化剂开发。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于阴凉、干燥、通风良好的环境中, 避免阳光直射和潮湿。储存温度应控制在 $2-8^{\circ}C$, 长期保存需充氮密封。使用时需佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。操作应在通风橱中进行, 远离火源和氧化剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $>96\%$, 并提供详细的质量分析报告 (COA)。根据化学品安全技术说明书 (MSDS), 4-叔丁氧基苯甲腈对眼睛和皮肤有刺激性, 误食或吸入可能有害。如发生接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理, 避免对环境造成污染。