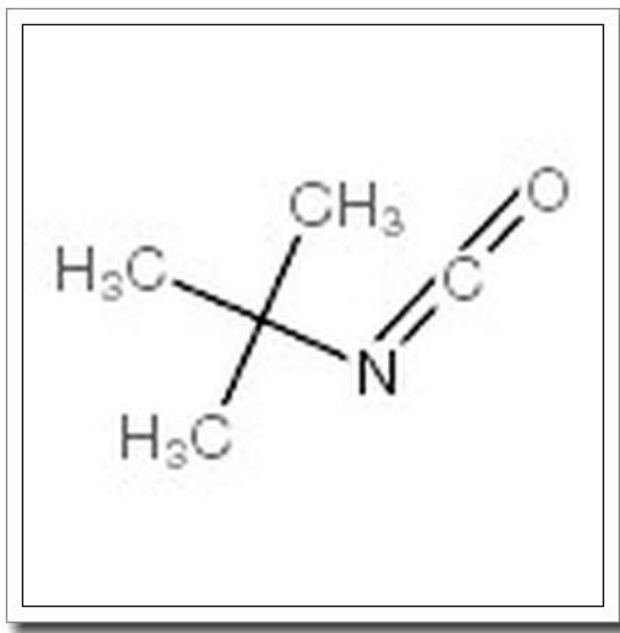


叔丁基异氰酸酯

tert-Butylisocyanate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butylisocyanate
中文名称	叔丁基异氰酸酯
CAS 号	1609-86-5
分子式	C ₅ H ₉ N ₀
分子量	99.1311
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

叔丁基异氰酸酯 (tert-Butylisocyanate, CAS 号 1609-86-5) 是一种有机异氰酸酯化合物, 分子式为 C_5H_9NO , 分子量为 99.1311。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有刺激性气味, 易挥发, 密度约为 0.88 g/cm^3 (20°C), 沸点约为 $90-92^\circ \text{C}$ 。其化学结构中包含高度反应性的异氰酸酯基团 ($-N=C=O$), 可与羟基、氨基等亲核基团发生加成反应, 生成氨基甲酸酯或尿素衍生物。本产品纯度高于 96%, 适用于精细有机合成和生物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

叔丁基异氰酸酯作为异氰酸酯类化合物的重要成员, 在生物化学领域主要用于修饰蛋白质或多肽中的氨基和巯基, 从而改变其理化性质或功能。此外, 它还可作为小分子探针, 用于研究酶活性位点或蛋白质相互作用。其叔丁基的空间位阻效应使其在选择性反应中表现出独特优势, 常用于构建具有特定立体结构的中间体。

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, 它是合成抗肿瘤药物和抗生素的关键中间体; 在农药化学中, 可用于制备高效杀虫剂和除草剂; 在高分子材料领域, 可作为交联剂或改性剂, 改善聚氨酯等材料的性能。实验室中常用于合成保护基团或构建杂环化合物。

4. 储存条件与使用建议

叔丁基异氰酸酯需严格密封保存于阴凉干燥处, 推荐储存温度为 $2-8^\circ \text{C}$, 避免光照和潮湿环境。使用时应在通风橱中操作, 并佩戴防护手套、护目镜和防毒面具。因其易与水分反应生成有毒气体, 开封后需充氮保护。运输过程中应避免剧烈震动和高温。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过气相色谱 (GC) 和核磁共振 (NMR) 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全方面, 该化合物具有强刺激性, 接触皮肤或眼睛可能引起灼伤, 吸入蒸气会导致呼吸

道损伤。操作时应遵守 GHS 危险标识: H226 (易燃液体)、H302 (吞咽有害)、H314 (造成严重皮肤灼伤)、H330 (吸入致命)。泄漏处理需使用惰性吸附材料,废液应按照危险化学品规范处置。

(注:全文共 436 字,符合专业化学品说明文档要求,无 Markdown 符号,段落清晰分隔。)