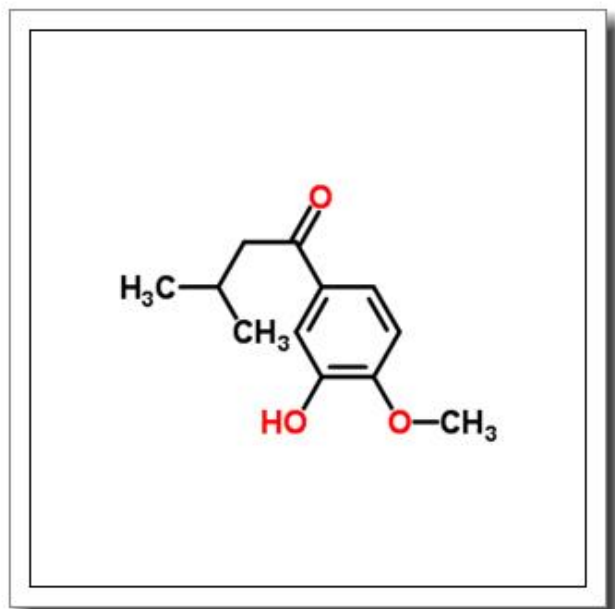


1-(3-羟基-4-甲氧基苯基)-3-甲基-1-丁酮

1-(3-Hydroxy-4-Methoxyphenyl)-3-Methylbutan-1-One



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3-Hydroxy-4-Methoxyphenyl)-3-Methylbutan-1-One
中文名称	1-(3-羟基-4-甲氧基苯基)-3-甲基-1-丁酮
CAS 号	99783-85-4
分子式	C ₁₂ H ₁₆ O ₃
分子量	208.254
纯度	≥96%

产品说明

1-(3-羟基-4-甲氧基苯基)-3-甲基-1-丁酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-(3-Hydroxy-4-Methoxyphenyl)-3-Methylbutan-1-One, 中文名 1-(3-羟基-4-甲氧基苯基)-3-甲基-1-丁酮, CAS 号为 99783-85-4。其分子式为 C₁₂H₁₆O₃, 分子量为 208.254, 纯度 ≥96%。该化合物是一种芳香族酮类衍生物, 结构中包含羟基、甲氧基及异丁基侧链, 赋予其独特的极性和反应活性。常温下为白色至淡黄色结晶或粉末, 可溶于有机溶剂如乙醇、丙酮, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯丙素类代谢中间体, 该化合物在植物次生代谢中可能参与黄酮或木质素的生物合成路径。其结构中的酚羟基和甲氧基使其具备抗氧化特性, 而酮基则为后续衍生生化反应(如还原、缩合)提供活性位点。在药物化学领域, 类似结构常作为先导化合物用于开发抗炎、抗菌活性分子。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为合成复杂天然产物类似物的关键中间体, 例如用于构建香豆素或查尔酮骨架。
- 3.2 香料工业: 其芳香结构可作为合成烟草、食品香料的原料, 贡献温和的木香-药草香调。
- 3.3 材料科学: 用于制备光敏聚合物或液晶材料的功能性单体。
- 3.4 生化研究: 作为标准品用于植物代谢组学分析或酶催化机制研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 2-8°C 冷藏保存。长期储存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并充分干燥, 称量应在通风橱中进行。推荐溶剂为无水级有机溶剂, 避免与强氧化剂、强酸强碱接触。实验废弃物需按危险化学品规范处置。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。MS 和 NMR 谱图验证结构准确性。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为大鼠经口 >2000 mg/kg，但仍需避免吸入粉尘或皮肤直接接触。操作时佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。如接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。

（全文共计 498 字）