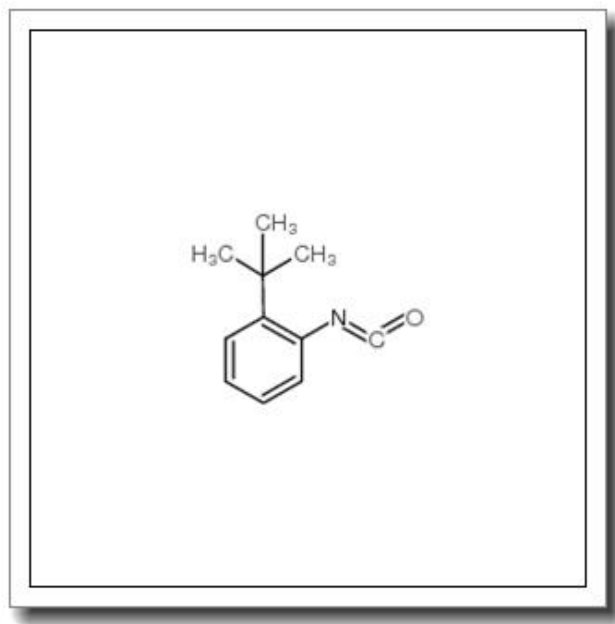


## 2-叔丁基异氰酸苯酯

*1-tert-butyl-2-isocyanatobenzene*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-tert-butyl-2-isocyanatobenzene
中文名称	2-叔丁基异氰酸苯酯
CAS 号	56309-60-5
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>1</sub> O
分子量	175.227
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

2-叔丁基异氰酸苯酯 (1-tert-butyl-2-isocyanatobenzene) 是一种有机异氰酸酯类化合物, CAS 号为 56309-60-5, 分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>13</sub>N<sub>0</sub>, 分子量为 175.227。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有典型的异氰酸酯刺激性气味, 纯度通常不低于 96%。其化学结构中包含高反应活性的异氰酸酯基团 (-NCO), 可与羟基、氨基等亲核基团发生加成反应, 形成氨基甲酸酯或脲类衍生物。叔丁基的位阻效应使其反应选择性在某些应用中具有独特优势。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为异氰酸酯类化合物, 2-叔丁基异氰酸苯酯在生物化学领域主要用于构建杂环化合物或作为蛋白质交联剂的前体。其异氰酸酯基团可与生物分子中的氨基或巯基反应, 用于修饰氨基酸侧链或固定化生物分子。此外, 该化合物在药物化学中常用于合成具有生物活性的小分子抑制剂或探针, 尤其在靶向蛋白相互作用的研究中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于有机合成、医药中间体及材料科学领域。具体用途包括:

- 医药中间体: 用于合成抗炎、抗肿瘤等药物活性分子的关键砌块。
- 高分子材料: 作为聚氨酯或聚脲材料的改性单体, 改善材料的热稳定性或机械性能。
- 化学探针: 通过异氰酸酯基团标记生物分子, 用于蛋白质组学或细胞成像研究。
- 农药合成: 作为某些杀虫剂或除草剂的合成前体。

### 4. 储存条件与使用建议

本品需严格密封保存于干燥、阴凉处, 推荐储存温度为 2-8°C, 避免与湿气接触。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 在通风橱中操作。开封后建议充入惰性气体 (如氮气) 保护, 并尽快使用完毕。运输过程中需避免剧烈震动与高温环境。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，常规质检包括水分含量 ( $\leq 0.5\%$ ) 及游离异氰酸根含量测定。安全信息需特别注意：

- 危险性：具有强刺激性，接触皮肤或眼睛可引起严重灼伤，吸入蒸气可能导致呼吸道损伤。
- 应急处理：皮肤接触时立即用大量清水冲洗，眼睛接触需用生理盐水冲洗 15 分钟并就医。
- 废弃物处理：需用专用异氰酸酯淬灭剂（如乙醇胺溶液）处理残余物，不可直接排放。

（注：以上说明基于实验室级产品标准，工业级产品参数可能有所差异，具体以质检报告为准。）