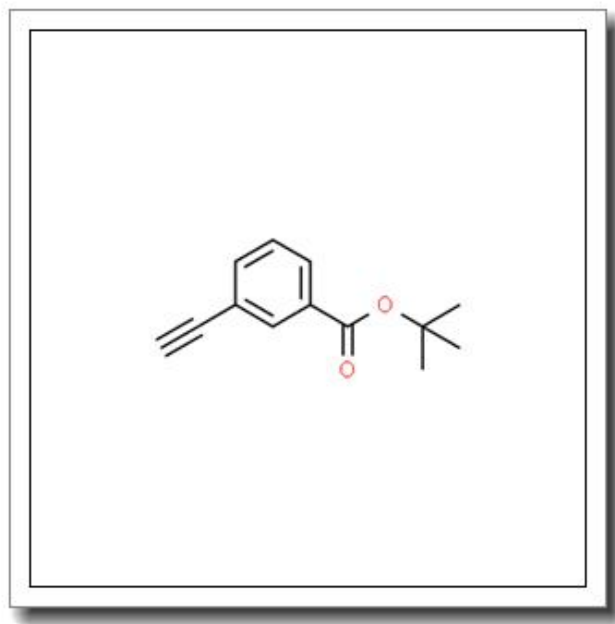


3-乙炔基苯甲酸叔丁酯

tert-Butyl 3-ethynylbenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 3-ethynylbenzoate
中文名称	3-乙炔基苯甲酸叔丁酯
CAS 号	914943-91-2
分子式	C ₁₃ H ₁₄ O ₂
分子量	202.25
纯度	≥ 96%

产品说明

3-乙炔基苯甲酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-乙炔基苯甲酸叔丁酯 (tert-Butyl 3-ethynylbenzoate) 是一种有机化合物, CAS 号为 914943-91-2, 分子式为 $C_{13}H_{14}O_2$, 分子量为 202.25。该化合物为无色至淡黄色液体或固体, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构包含乙炔基和叔丁酯基团, 具有较高的反应活性, 尤其在炔烃偶联反应中表现出优异的性能。

2. 生物化学功能与重要性

3-乙炔基苯甲酸叔丁酯在生物化学领域主要用于点击化学 (Click Chemistry) 反应, 特别是铜催化的叠氮-炔烃环加成反应 (CuAAC)。其乙炔基团可与叠氮化合物高效结合, 形成稳定的三唑环结构。这一特性使其成为蛋白质标记、药物开发和生物共轭研究中的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发、材料科学和生物标记领域。具体用途包括:

- 作为小分子药物或生物大分子 (如抗体、核酸) 的修饰试剂。
- 用于合成功能化聚合物或纳米材料, 赋予材料特定的化学或生物活性。
- 在荧光探针和分子影像学中作为标记基团, 用于细胞或组织成像研究。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于 $-20^{\circ}C$ 或更低温度下避光保存, 以保持其稳定性。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 避免与湿气或氧化剂接触。使用时应在通风良好的环境中操作, 并佩戴适当的防护装备 (如手套、护目镜)。溶解性测试表明, 该化合物易溶于有机溶剂 (如 DMSO、DMF、THF), 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 进行严格质量控制, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息如下:

- 可能对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性, 避免直接接触。
- 如不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。

- 远离火源和高温环境，因其可能释放易燃气体。
- 废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废物处理机构处置。

本产品仅供科研用途，不适用于人体或临床诊断。使用前请仔细阅读材料安全数据表（MSDS）并遵循实验室安全规范。