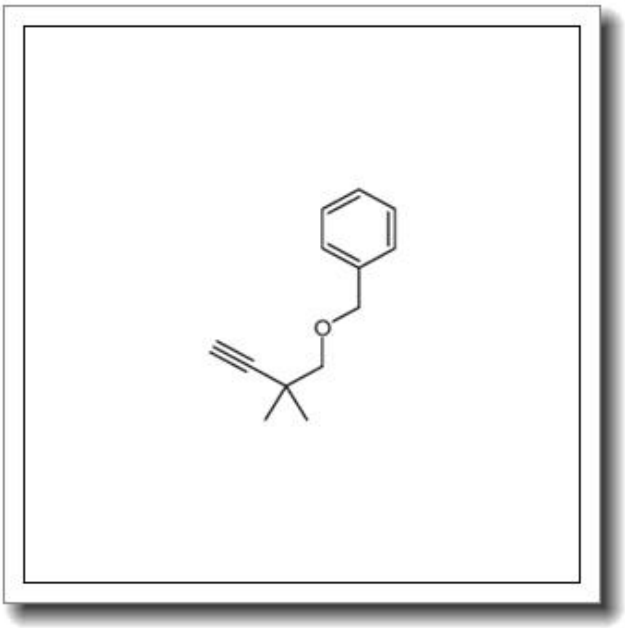
4-苄氧基-3,3-二甲基-1-丁炔

{[(2,2-Dimethyl-3-butyn-1-yl)oxy]methyl}benzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	{[(2,2-Dimethyl-3-butyn-1-yl)oxy]methyl}benzene
中文名称	4-苄氧基-3,3-二甲基-1-丁炔
CAS 号	1092536-54-3
分子式	C13H16O
分子量	188.266
纯度	≧96%

产品说明

4-苄氧基-3,3-二甲基-1-丁炔产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为{[(2,2-Dimethyl-3-butyn-1-yl)oxy]methyl}benzene，中文命名为4-苄氧基-3,3-二甲基-1-丁炔，CAS号为1092536-54-3。其分子式为C13H16O，分子量为188.266，纯度≥96%。该化合物是一种含炔基和苄氧基的有机中间体，具有独特的空间位阻效应和反应活性，常温下通常表现为无色至淡黄色液体。其结构中的炔键和苄氧基使其在有机合成中表现出优异的官能团兼容性。

2. 生物化学功能与重要性

作为炔烃类化合物，该产品可通过点击化学（如CuAAC反应）高效构建杂环或聚合物骨架，在生物共轭和标记领域具有重要价值。苄氧基的引入增强了分子的脂溶性，使其在药物载体设计和跨膜输送研究中具有潜在应用。此外，3,3-二甲基结构提供的立体位阻可调控反应选择性，在不对称合成中作为关键手性辅助基团。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域：

- 医药中间体：用于合成抗肿瘤或抗炎药物的炔基化前体
- 材料科学：作为单体参与聚合反应制备功能性高分子材料
- 生物探针：通过炔基-叠氮环加成反应标记生物分子
- 农药研发：作为结构修饰单元优化农用化学品活性

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封储存，温度控制在2-8℃避光保存。开封后需充氮气保护并尽快使用。使用时应佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于THF、DCM等有机溶剂，推荐使用前通过TLC或HPLC监测纯度变化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经HPLC检测纯度≥96%，GC-MS确认结构一致性。危险类别为刺激性物质

（皮肤刺激类别 2），UN 编号未作规定。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃处置需符合当地法规，建议通过专业化学品回收机构处理。详细安全数据参见随货 MSDS 文件。