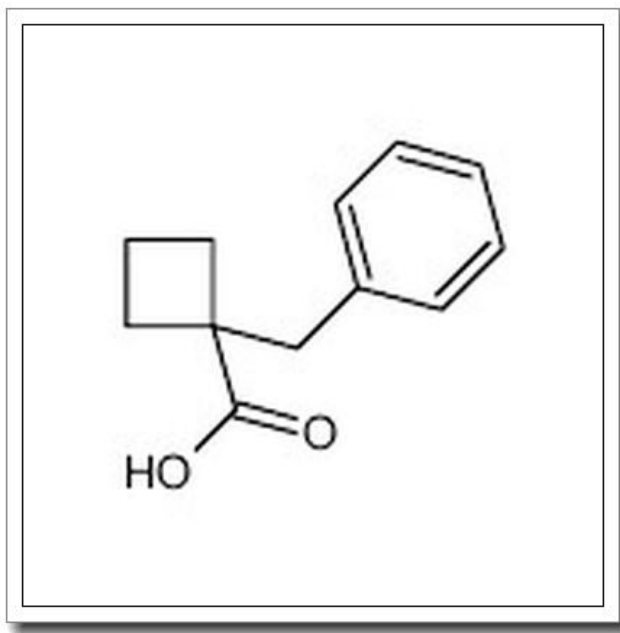


1-苄基环丁烷羧酸

1-Benzylcyclobutanecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Benzylcyclobutanecarboxylic acid
中文名称	1-苄基环丁烷羧酸
CAS 号	114672-02-5
分子式	C ₁₂ H ₁₄ O ₂
分子量	190.238
纯度	>96%

产品说明

1-苄基环丁烷羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-苄基环丁烷羧酸 (1-Benzylcyclobutanecarboxylic acid) 是一种有机羧酸化合物，化学式为 $C_{12}H_{14}O_2$ ，分子量为 190.238，CAS 号为 114672-02-5。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度通常高于 96%。其结构特征为环丁烷环上连接苄基和羧酸基团，赋予其独特的空间位阻和反应活性，适合作为有机合成中间体或生物活性分子修饰的起始原料。

2. 生物化学功能与重要性

作为环丁烷衍生物，该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。其刚性环状结构可增强目标分子的构象稳定性，而羧酸基团则便于进一步衍生化（如酯化、酰胺化）。在生物活性分子设计中，苄基的引入可调节化合物的亲脂性，影响其细胞膜穿透能力或靶标结合特性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

(1) 医药研发：作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的合成砌块，用于抗肿瘤或抗炎药物开发。

(2) 材料科学：用于合成具有特殊光学或机械性能的高分子单体。

(3) 学术研究：作为探针分子研究环丁烷类化合物的反应机理或代谢行为。

典型用途包括 Suzuki 偶联反应的底物、手性催化剂配体的前体等。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥避光条件下长期储存，短期使用可置于 $2-8^{\circ}C$ 环境。开封后需充惰性气体（如氮气）保护，避免吸湿或氧化。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砜（DMSO）、甲醇等有机溶剂，水溶性较低（ $<0.1\text{ mg/mL}$ ）。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间一致性控制在 $\pm 1\%$ 范围内。MS 和 NMR 谱图验证结构准确性。安全数据表明，该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应避免直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并按危险废弃物处置。更多毒理学数据可参考 SDS 第 11 节（毒理学信息）。

注：本说明基于当前研究数据编制，实际应用前请根据具体实验条件进行验证。