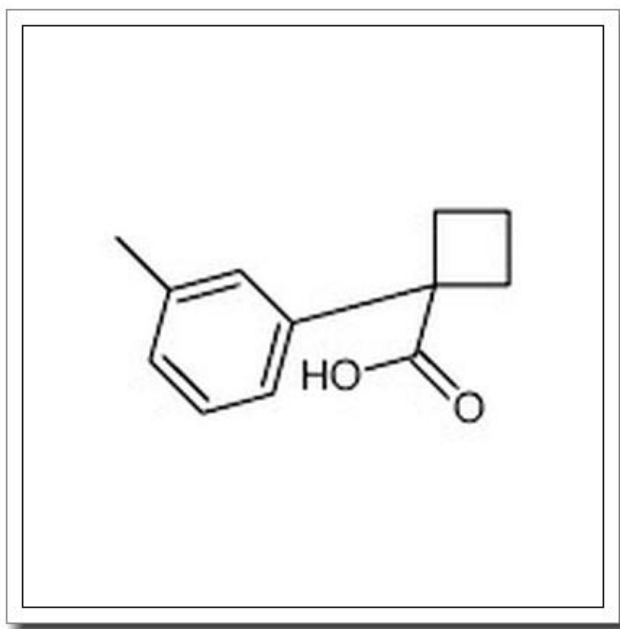


1-(3-methylphenyl)cyclobutane-1-carboxylic acid

1-(3-methylphenyl)cyclobutane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3-methylphenyl)cyclobutane-1-carboxylic acid
中文名称	1-(3-甲基苯基)环丁烷-1-羧酸
CAS 号	202737-32-4
分子式	C ₁₂ H ₁₄ O ₂
分子量	190.238
纯度	>96%

产品说明

1-(3-methylphenyl)cyclobutane-1-carboxylic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-(3-methylphenyl)cyclobutane-1-carboxylic acid 是一种有机羧酸化合物，化学式为 C₁₂H₁₄O₂，分子量为 190.238。其结构中包含一个环丁烷基团与 3-甲基苯基相连，羧酸官能团位于环丁烷的 1 位。该化合物 CAS 号为 202737-32-4，常温下为白色至类白色结晶或粉末，纯度标准 >96%。其独特的芳环-脂环结构使其在有机合成中具有显著的立体位阻效应和反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为羧酸衍生物，该化合物可通过酯化、酰胺化等反应参与构建复杂分子骨架。其苯环上的甲基修饰可调节脂溶性和电子效应，而环丁烷结构则能增强分子刚性。这些特性使其在药物化学中常用于先导化合物优化，特别是在设计靶向蛋白结合口袋的小分子抑制剂时，可平衡亲水性与疏水性需求。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药中间体合成和材料科学领域。在药物研发中，常用于构建非甾体抗炎药 (NSAIDs) 类似物或中枢神经系统药物候选分子。此外，其可作为配体用于金属有机框架 (MOFs) 材料的制备，或作为单体参与高性能聚合物的合成。实验级用途包括有机催化反应底物、不对称合成手性模板等。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 至 4° C 干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充入惰性气体保护。使用前需恢复至室温以减少结露风险。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等极性有机溶剂，水溶性较低 (<0.1 mg/mL)。实验操作建议在通风橱中进行，并避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%，批次间差异控制在 ±1% 以内。MS 与 NMR 谱图数据可随货提供。安全数据表明，该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时需佩戴防护手

套及护目镜。若意外接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地有机化学品处理法规。更多技术细节请参阅随附的 Material Safety Data Sheet (MSDS)。