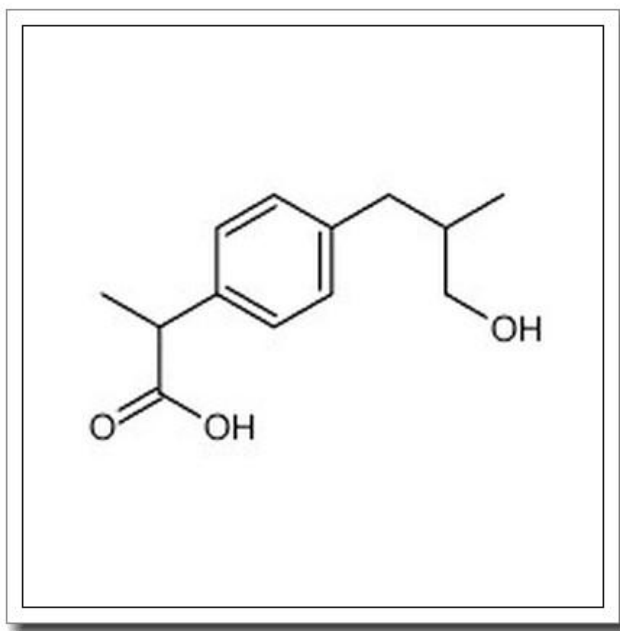


2-[4-(3-hydroxy-2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid

2-[4-(3-hydroxy-2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[4-(3-hydroxy-2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid
中文名称	2-[4-(3-hydroxy-2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid
CAS 号	53949-54-5
分子式	C ₁₃ H ₁₈ O ₃
分子量	222.28
纯度	>96%

产品说明

2-[4-(3-hydroxy-2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-[4-(3-hydroxy-2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid, CAS 号 53949-54-5, 分子式 C₁₃H₁₈O₃, 分子量 222.28。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，具有典型的羧酸和羟基官能团特性，可溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水。其结构中的苯丙酸骨架与亲水性侧链赋予其独特的理化性质，适合作为医药中间体或生化研究试剂。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过苯环和羧基的电子效应参与多种生物化学相互作用，可能作为酶抑制剂或受体调节剂的合成前体。其羟基修饰结构增强了分子极性，在药物设计中被用于优化代谢稳定性和组织渗透性。在炎症介质研究中，类似结构的衍生物已被报道与前列腺素合成通路相关。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的结构类似物，用于新型镇痛或抗炎化合物的合成；
- (2) 材料科学：用于制备功能性高分子材料的单体；
- (3) 学术研究：作为标准品用于分析检测方法开发或代谢途径研究。

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，避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用预冷的无水乙醇，配制后溶液建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构，批次间纯度差异 <1%。安全数据表明其对皮肤和眼睛有轻微刺激性 (GHS 分类：刺激性类别 2)，操作时应避免

吸入粉尘。如意外接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）