

3-(2-methylphenyl)benzoic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(2-methylphenyl)benzoic acid
产品目录号	
CAS 号	168618-44-8
分子式	C ₁₄ H ₁₂ O ₂
分子量	212.244
纯度	>96%

产品说明

3-(2-甲基苯基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(2-甲基苯基)苯甲酸（化学名称：3-(2-methylphenyl)benzoic acid）是一种有机芳香羧酸，分子式为 C₁₄H₁₂O₂，分子量为 212.244。其 CAS 号为 168618-44-8，纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。其结构包含苯甲酸骨架与邻位甲基取代的苯环，赋予其独特的化学性质，如适度的极性和可修饰性。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸衍生物，该化合物在生物化学研究中常作为中间体或配体使用。其羧基团可参与酯化、酰胺化等反应，而芳香环结构使其能够与蛋白质或酶发生疏水相互作用。在药物化学领域，此类结构常用于设计靶向酶或受体的先导化合物，尤其在抗炎和抗菌活性分子的开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

3-(2-甲基苯基)苯甲酸广泛应用于医药研发、材料科学和有机合成。在医药领域，它可作为合成非甾体抗炎药（NSAIDs）或抗菌剂的中间体。在材料科学中，可用于制备液晶材料或高分子聚合物的功能性单体。此外，在学术研究中，该化合物常用于探索芳香羧酸类分子的构效关系或作为分析标准品。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉处，推荐储存温度为 2-8° C，避免光照和潮湿环境。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解建议采用极性有机溶剂，如配制 DMSO 母液后进一步稀释。长期储存前建议充入惰性气体（如氮气）以延长稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，并提供批次相关的质检报告（COA）。其急性毒性数据为 LD₅₀（大鼠，口服）>2000 mg/kg，属于低毒类化合物，但仍需避免吸入或

皮肤直接接触。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。如发生意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗人类疾病。具体实验方案需结合文献与安全规范设计。