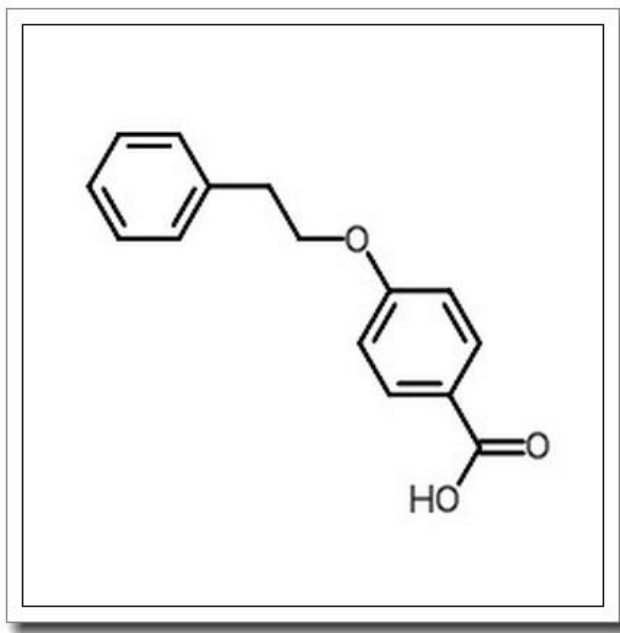


4-(2-苯基乙氧基)苯甲酸

4-(2-Phenylethoxy)benzoic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 4-(2-Phenylethoxy)benzoic acid |
| 中文名称 | 4-(2-苯基乙氧基)苯甲酸 |
| CAS 号 | 30762-06-2 |
| 分子式 | C ₁₅ H ₁₄ O ₃ |
| 分子量 | 242.27 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4-(2-苯基乙氧基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(2-苯基乙氧基)苯甲酸 (CAS 号: 30762-06-2) 是一种有机芳香族羧酸衍生物, 分子式为 $C_{15}H_{14}O_3$, 分子量 242.27。该化合物由苯甲酸母核与 2-苯基乙氧基取代基构成, 呈现白色至类白色结晶粉末形态。其结构中同时具备羧酸官能团和醚键, 赋予其独特的酸碱两性与溶解特性 (易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水)。本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸类化合物的衍生物, 该物质可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应, 同时苯环结构可发生亲电取代。其分子设计结合了芳香族疏水性与极性官能团, 在药物化学中常用于构建靶向分子支架。特别值得注意的是, 2-苯基乙氧基的引入增强了分子穿透细胞膜的能力, 使其在药物载体开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于三个领域: 一是医药中间体合成, 尤其用于非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的结构修饰; 二是作为液晶材料的前驱体, 其刚性分子结构有助于介晶相的形成; 三是在生化研究中作为酶抑制剂开发的候选分子。具体实验用途包括但不限于: 体外激酶抑制试验、分子对接研究的配体化合物、高分子材料改性添加剂。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 惰性气体 (如氩气) 环境下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温平衡 2 小时, 避免冷凝水吸附。实验操作建议在通风橱中进行, 配制溶液时优先选用质谱级溶剂以降低杂质干扰。针对不同应用场景推荐浓度: 细胞实验 $\leq 10 \mu\text{M}$, 化学合成投料比 1:1.2 (摩尔比)。

5. 质量控制与安全信息

本批次产品经三重质控: 核磁共振氢谱 ($^1\text{H-NMR}$) 验证结构, 高效液相色谱

(HPLC) 测定纯度, 质谱 (MS) 确认分子量。安全数据表明该化合物对眼睛和呼吸道有轻微刺激性 (GHS 分类: Eye Irrit. 2), 操作时应佩戴护目镜与防尘口罩。废弃物处理需遵循有机酸类化合物处置规范, 不可直接排入下水系统。

(注: 本说明基于当前研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化参数。)