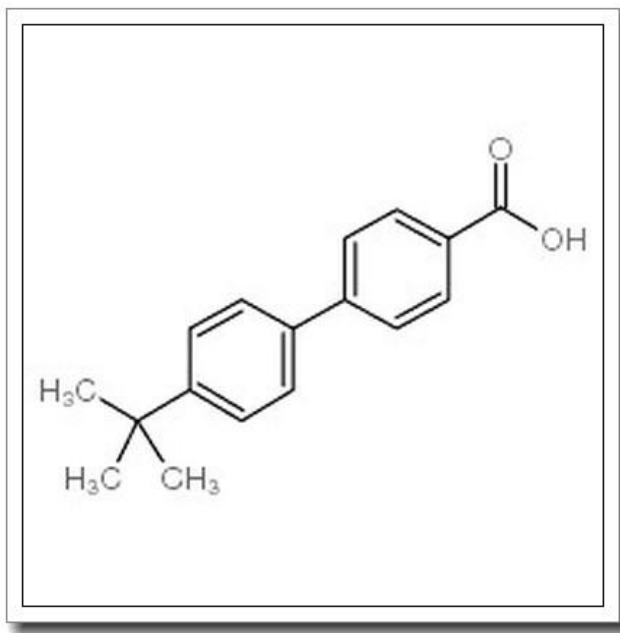


4-(4-叔丁基苯基)苯甲酸

4-(4-tert-butylphenyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(4-tert-butylphenyl)benzoic acid
中文名称	4-(4-叔丁基苯基)苯甲酸
CAS 号	5748-42-5
分子式	C ₁₇ H ₁₈ O ₂
分子量	254.324
纯度	>96%

产品说明

4-(4-叔丁基苯基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(4-叔丁基苯基)苯甲酸 (CAS 号: 5748-42-5) 是一种有机芳香羧酸, 分子式为 $C_{17}H_{18}O_2$, 分子量为 254.324。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有疏水性基团 (叔丁基苯基) 与亲水性羧酸基团的双重特性, 使其在有机溶剂中表现出良好的溶解性, 如溶于甲醇、乙醇和二甲基亚砷 (DMSO), 微溶于水。其化学结构中的苯环与羧酸基团为后续衍生化反应提供了活性位点。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸衍生物, 该化合物可通过羧酸基团参与酯化、酰胺化等反应, 或通过苯环进行亲电取代修饰。其叔丁基苯基结构赋予分子空间位阻效应, 可能影响与其他生物分子 (如蛋白质或酶) 的相互作用, 因此在药物化学中常作为中间体用于设计靶向分子或抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品可用于合成非甾体抗炎药 (NSAIDs) 或抗菌剂的中间体。材料科学中, 其可作为液晶材料的单体或高分子聚合物的改性剂。此外, 在有机合成中, 它可用于构建复杂芳环体系或作为配体参与金属催化反应。

4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于干燥、避光的 2-8°C 环境中, 避免与强氧化剂接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。若需溶解, 推荐使用极性有机溶剂 (如 DMSO), 并可通过超声辅助加速溶解。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%, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 其可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如意外吸入或摄入, 应立即就医并提供 MSDS 信息。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：以上信息基于现有研究数据，实际应用前请结合具体实验条件验证其适用性。