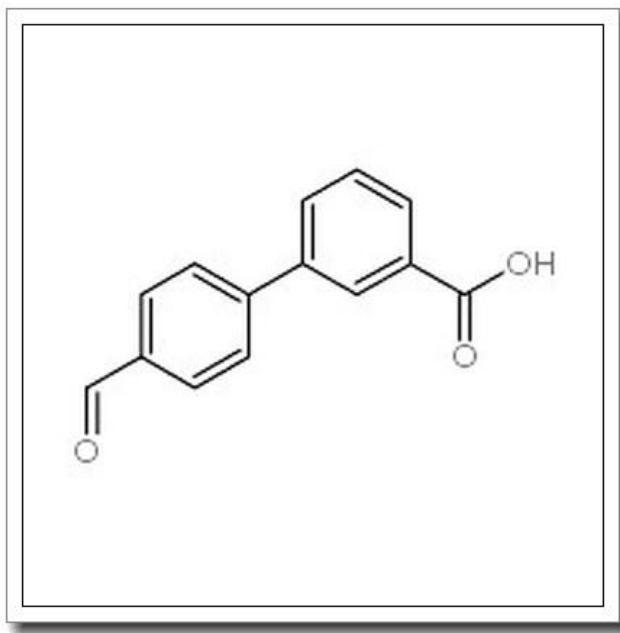


4-甲酰基联苯-3-羧酸

3-(4-formylphenyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(4-formylphenyl)benzoic acid
中文名称	4-甲酰基联苯-3-羧酸
CAS 号	222180-20-3
分子式	C ₁₄ H ₁₀ O ₃
分子量	226.227
纯度	>96%

产品说明

3-(4-甲酰基苯基)苯甲酸产品说明书

产品概述与化学特性

3-(4-甲酰基苯基)苯甲酸 (英文名: 3-(4-formylphenyl)benzoic acid, CAS 号: 222180-20-3) 是一种具有芳香醛和羧酸双官能团的有机化合物, 分子式为 $C_{14}H_{10}O_3$, 分子量 226.227。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 可溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和部分有机溶剂, 微溶于水。其结构中苯环与醛基、羧基的协同作用使其成为重要的有机合成中间体。

生物化学功能与重要性

作为多功能芳香族衍生物, 该化合物兼具醛基的反应活性与羧酸的配位能力。醛基可参与缩合、亲核加成等反应, 羧基则易形成酯、酰胺或金属盐类。在生物化学领域, 其结构特性可用于设计酶抑制剂、荧光探针或药物载体, 尤其在靶向药物开发中作为连接臂或功能化修饰基团。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成抗肿瘤、抗炎药物活性分子, 如酪氨酸激酶抑制剂的前体修饰。
2. 材料科学: 作为液晶材料、高分子聚合物的功能性单体, 改善材料的光电性能。
3. 分析化学: 衍生化试剂, 用于高效液相色谱 (HPLC) 检测中醛类或氨基化合物的标记。
4. 科研试剂: 在金属有机框架 (MOFs) 或超分子组装中作为配体使用。

储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 2-8°C 冷藏保存。长期储存需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议采用梯度升温法 (如先溶于少量 DMSO 再稀释), 以提升溶解度。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（NMR）与质谱（MS）验证结构。安全数据如下：

1. 危害标识：刺激性（H315-H319），接触后需立即用清水冲洗。
2. 个人防护：佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。
3. 废弃处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入环境。

注：具体实验方案请参阅相关文献或咨询技术支持。本说明基于现有研究数据，实际应用需结合实验条件优化。