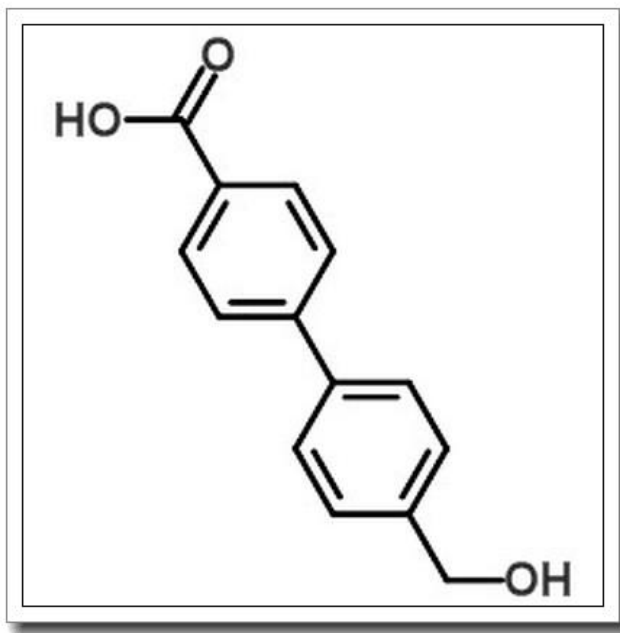


4-羟基甲基-联苯-4-羧酸

4-[4-(hydroxymethyl)phenyl]benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[4-(hydroxymethyl)phenyl]benzoic acid
中文名称	4-羟基甲基-联苯-4-羧酸
CAS 号	49743-87-5
分子式	C ₁₄ H ₁₂ O ₃
分子量	228.243
纯度	>96%

产品说明

4-[4-(羟甲基)苯基]苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-[4-(羟甲基)苯基]苯甲酸 (CAS 号: 49743-87-5) 是一种具有联苯结构的芳香族羧酸衍生物, 分子式为 $C_{14}H_{12}O_3$, 分子量 228.243。该化合物包含一个苯甲酸基团和一个羟甲基取代的苯环, 纯度 >96%, 常温下为白色至类白色结晶粉末。其独特的双官能团结构 (羧酸和羟甲基) 赋予其良好的溶解性, 可溶于极性有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为有机合成中间体, 该化合物可通过羧基和羟甲基的化学反应 (如酯化、缩合或偶联) 参与复杂分子的构建。其联苯骨架常见于药物活性分子中, 例如非甾体抗炎药 (NSAIDs) 和激酶抑制剂的设计。羟甲基的引入增强了分子修饰的灵活性, 可用于连接荧光标记物或生物相容性载体, 在化学生物学研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品常用于构建靶向化合物的核心结构, 或作为抗体-药物偶联物 (ADC) 的连接单元。材料科学中, 可用于合成液晶材料或高分子单体。实验室研究方面, 可作为标准品用于 HPLC 或质谱分析方法的开发。此外, 在荧光探针和 MOFs (金属有机框架) 材料的合成中也有潜在应用。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性环境中, 长期储存温度需控制在 2-8°C。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 以防止氧化。使用前需恢复至室温并短暂离心以避免结块影响称量。实验操作建议在通风橱中进行, 避免直接吸入粉尘。溶解时可采用温和加热 ($\leq 60^\circ\text{C}$) 或超声辅助以提高效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 双重验证, 确保杂质含量 <4%。MSDS 数据显示其急性毒性较低 ($LD_{50} > 2000 \text{ mg/kg}$, 大鼠经口), 但仍需避免与眼睛、皮肤直接接触。若发

生接触，立即用大量清水冲洗至少 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验体系进一步优化。