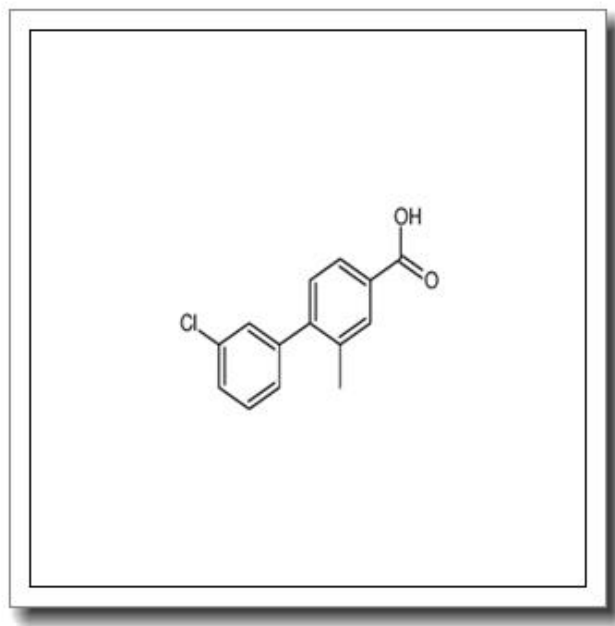


3-氯-2-甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸

4-(3-chlorophenyl)-3-methylbenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(3-chlorophenyl)-3-methylbenzoic acid
中文名称	3-氯-2-甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸
CAS 号	1261928-83-9
分子式	C ₁₄ H ₁₁ ClO ₂
分子量	246.689
纯度	≥96%

产品说明

3-氯-2-甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 4-(3-chlorophenyl)-3-methylbenzoic acid, CAS 号 1261928-83-9, 分子式 C₁₄H₁₁ClO₂, 分子量 246.689。其结构中含有一个氯代苯环和一个甲基取代的苯甲酸基团，赋予其独特的极性和反应活性。纯度 ≥96%，可通过 HPLC 和熔点测定（文献值约 180-182° C）进行验证。该化合物在有机溶剂如甲醇、二甲基亚砷中溶解性良好，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸衍生物，该分子可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应，同时氯原子和甲基的引入增强了其作为中间体的结构多样性。在药物化学中，此类结构常作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的骨架，具有潜在的生物活性。其特异性结构也适用于材料科学中的液晶材料合成。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发领域，尤其作为构建杂环化合物的关键中间体，可用于抗肿瘤、抗炎药物的先导化合物优化。在农用化学品中，可作为除草剂或杀菌剂的合成前体。此外，在有机光电材料开发中，其刚性联苯结构有助于调节材料的光电性能。

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，长期储存温度应控制在 2-8° C。开封后需充氮保护以避免吸湿和氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中操作。溶解时建议优先选用 DMF 或 THF 等极性溶剂，必要时可加热至 60° C 促进溶解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和核磁共振谱（¹H NMR）验证结构，批次纯度通过 HPLC 检测。安

全数据表明, 该物质对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类: Category 2), 操作时需避免吸入粉尘。如接触皮肤, 应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地危险化学品法规, 建议采用专业焚烧法。

(注: 本说明基于现有实验数据撰写, 具体应用需结合用户实际需求进行验证。)