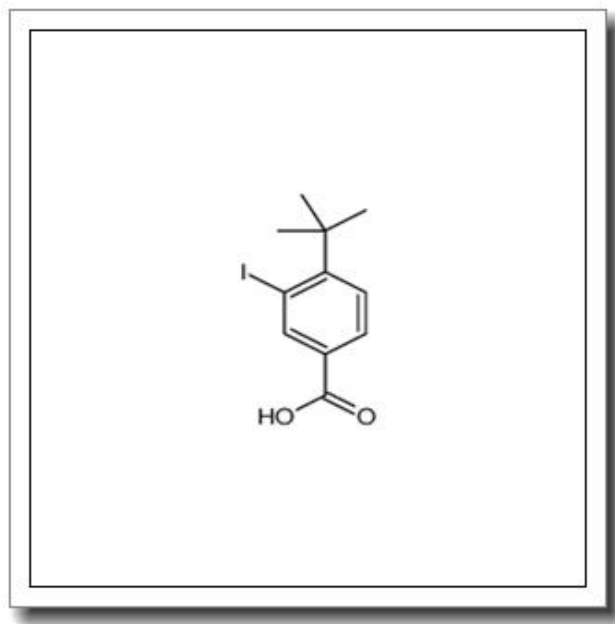


4-叔丁基-3-碘苯甲酸

4-(tert-Butyl)-3-iodobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(tert-Butyl)-3-iodobenzoic acid
中文名称	4-叔丁基-3-碘苯甲酸
CAS 号	91131-72-5
分子式	C ₁₁ H ₁₃ I ₂ O ₂
分子量	304.124
纯度	≥ 96%

产品说明

4-叔丁基-3-碘苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-叔丁基-3-碘苯甲酸（化学名称：4-(tert-Butyl)-3-iodobenzoic acid）是一种有机碘化合物，分子式为 $C_{11}H_{13}IO_2$ ，分子量为 304.124。该化合物为白色至类白色结晶粉末，CAS 号为 91131-72-5，纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中的叔丁基和碘原子赋予其独特的空间位阻效应及反应活性，使其在有机合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯甲酸衍生物，兼具羧酸和碘原子的双重官能团特性。羧基可参与酯化、酰胺化等反应，而碘原子可作为过渡金属催化反应（如 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化）的关键位点。其叔丁基结构能增强脂溶性，在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰，以优化生物利用度或靶向性。

3. 主要应用领域与具体用途

4-叔丁基-3-碘苯甲酸广泛应用于医药中间体、材料科学及配体合成领域。在药物研发中，它是构建抗炎、抗肿瘤化合物的重要砌块；在材料领域，可用于合成液晶单体或光电功能材料；此外，还可作为金属催化反应的配体前体，提升反应效率与选择性。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8°C 避光干燥环境中，避免与强氧化剂接触。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，防止碘原子氧化或脱卤。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砜（DMSO）、甲醇等有机溶剂，水溶性较低，配制溶液时需注意溶剂选择。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其 LD50（大鼠口服） > 2000 mg/kg，但仍需佩戴防护手套及护目镜操作。废弃物应按照规定处理。

害化学品规范处置，避免环境污染。详细安全信息请参阅随附的MSDS（化学品安全技术说明书）。