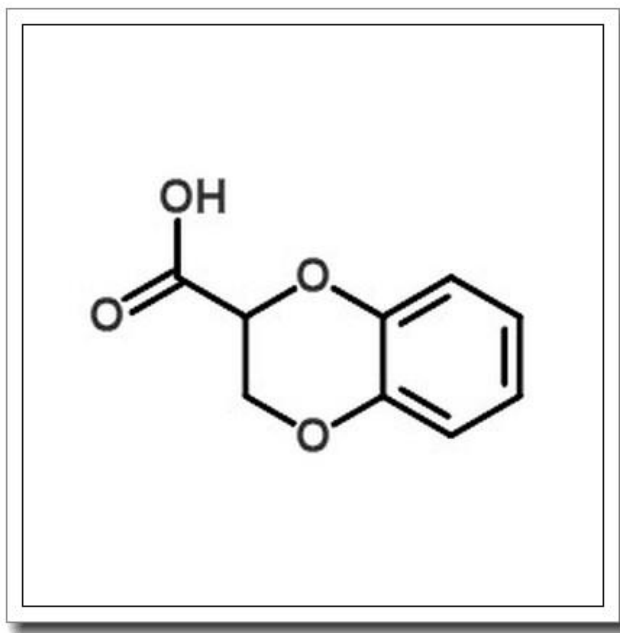


1,4-苯并二噁烷-2-羧酸

1,4-Benzodioxane-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,4-Benzodioxane-2-carboxylic acid
中文名称	1,4-苯并二噁烷-2-羧酸
CAS 号	34385-93-8
分子式	C ₉ H ₈ O ₄
分子量	180.157
纯度	>96%

产品说明

1, 4-苯并二噁烷-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1, 4-苯并二噁烷-2-羧酸 (1, 4-Benzodioxane-2-carboxylic acid) 是一种含苯并二噁烷骨架的羧酸类化合物, 化学式为 $C_9H_8O_4$, 分子量 180.157, CAS 号为 34385-93-8。其结构由苯环与二噁烷环稠合而成, 羧基位于二噁烷环的 2 位, 赋予其独特的极性和反应活性。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 可溶于甲醇、乙醇等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体, 其苯并二噁烷结构常见于药物和天然产物中, 具有调节脂溶性、增强代谢稳定性的作用。羧酸基团可进一步衍生为酯、酰胺等官能团, 广泛应用于药物化学和材料科学领域。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于构建肾上腺素能受体调节剂、抗焦虑药物及抗菌化合物的核心骨架。此外, 在有机合成中可作为手性合成子或配体, 参与不对称催化反应。在材料科学中, 可用于制备功能性高分子单体或涂层添加剂。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在 2-8°C 以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护, 避免吸湿和氧化。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议采用温和加热 (<50°C) 与超声辅助。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 其急性毒性较低 ($LD_{50} > 2000$ mg/kg, 大鼠口服), 但仍需佩戴防护手套和护目镜。废弃物处理应遵循当地化学品管理法规, 不可直接排放至环境中。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。)