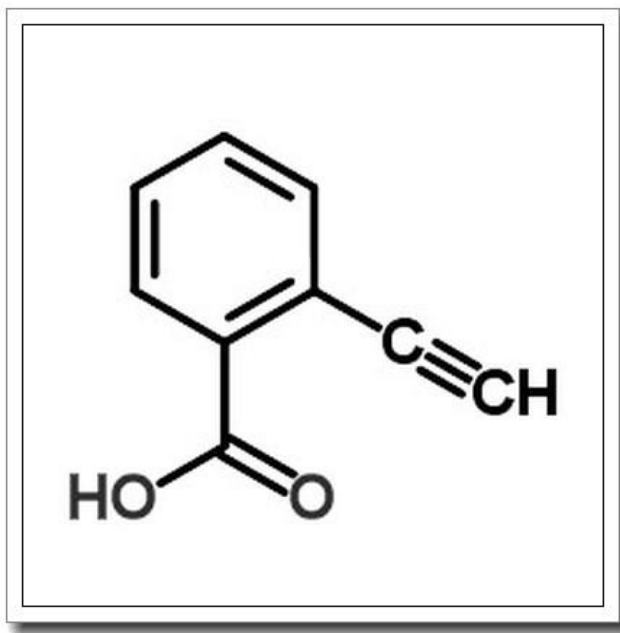


2-乙炔苯甲酸

2-ethynylbenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-ethynylbenzoic acid
中文名称	2-乙炔苯甲酸
CAS 号	33578-00-6
分子式	C ₉ H ₆ O ₂
分子量	146.143
纯度	>96%

产品说明

2-乙炔苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-乙炔苯甲酸 (2-Ethynylbenzoic acid, CAS 号 33578-00-6) 是一种含炔基的芳香羧酸化合物, 分子式为 $C_9H_6O_2$, 分子量 146.143。其结构特征为苯环上同时连接羧酸基团 ($-COOH$) 和乙炔基 ($-C\equiv CH$), 赋予其独特的反应活性。常温下为白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 微溶于水。该化合物在紫外光区具有特征吸收峰, 需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为炔烃类衍生物, 2-乙炔苯甲酸可通过点击化学 (如 CuAAC 反应) 高效形成三唑环结构, 是生物共轭和标记的关键中间体。其羧酸基团可进一步酯化或酰胺化, 用于修饰生物大分子。在药物化学中, 该结构片段能增强化合物与靶蛋白的疏水相互作用, 常见于激酶抑制剂的设计。

3. 主要应用领域与具体用途

- (1) 医药研发: 作为小分子砌块, 用于构建抗肿瘤、抗炎药物先导化合物;
- (2) 材料科学: 参与合成功能性高分子材料, 如自修复聚合物;
- (3) 生物探针: 通过炔基-叠氮环加成反应标记核酸或蛋白质;
- (4) 农业化学: 作为农药中间体, 优化杀虫剂分子结构。

4. 储存条件与使用建议

储存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 密封避光保存, 有效期 24 个月。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免接触强氧化剂。建议溶解前短暂超声处理以加速溶解, 工作液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 验证结构。安全数据: 急性毒性 (口服大鼠 LD_{50}) > 500 mg/kg, 穿戴防护手套/眼镜操作。若接触皮肤, 立即用肥皂水冲洗; 吸入粉尘时转移至通风处。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注: 实际使用前请查阅最新版 MSDS 并严格遵循实验室安全规程)