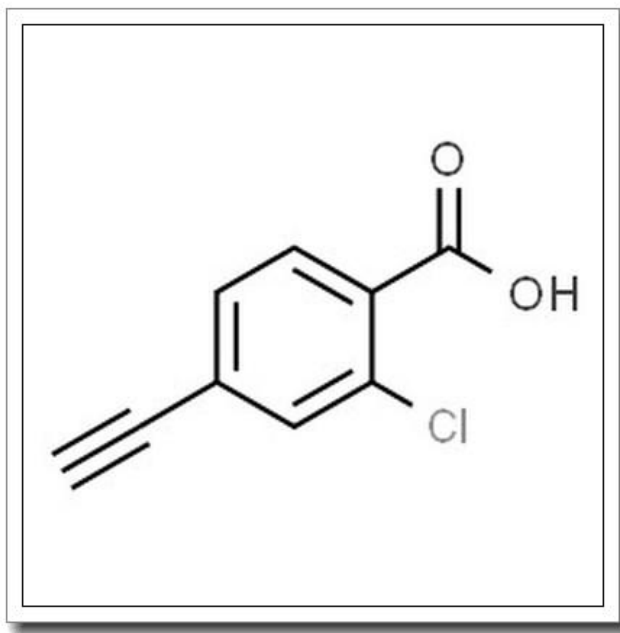


2-氯-4-乙炔基苯甲酸

2-Chloro-4-ethynylbenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-4-ethynylbenzoic acid
中文名称	2-氯-4-乙炔基苯甲酸
CAS 号	2168559-67-7
分子式	C ₉ H ₅ ClO ₂
分子量	180.59
纯度	>96%

产品说明

2-氯-4-乙炔基苯甲酸产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-氯-4-乙炔基苯甲酸 (2-Chloro-4-ethynylbenzoic acid) 是一种有机芳香酸衍生物，化学式为 $C_9H_5ClO_2$ ，分子量为 180.59。其结构中包含氯取代基和乙炔基团，赋予其独特的反应活性。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，CAS 号为 2168559-67-7，纯度通常高于 96%。其羧酸基团使其易于参与酯化、酰胺化等反应，而乙炔基团可作为点击化学（如铜催化的叠氮-炔环加成反应）的关键位点。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有重要价值，其乙炔基团可作为生物正交反应的标记基团，广泛应用于蛋白质、核酸等生物大分子的修饰与追踪。氯原子的引入增强了分子的疏水性，可能影响其与靶标蛋白的相互作用，因此在药物化学中常用于先导化合物的结构优化。

3. 主要应用领域与具体用途

2-氯-4-乙炔基苯甲酸主要用于以下领域：

- 药物研发：作为中间体用于合成具有抗肿瘤或抗炎活性的小分子化合物。
- 化学生物学：通过点击化学标记生物分子，用于荧光探针或亲和纯化试剂的制备。
- 材料科学：作为单体或交联剂参与功能高分子材料的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中，储存温度范围为 2-8°C。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护，以防吸湿或氧化。使用时需佩戴防护手套和护目镜，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用极性有机溶剂（如 DMF、DMSO），并注意避免强酸、强碱或高温条件导致的分解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明，其可能对眼睛、皮肤和呼吸道

有刺激性，操作应在通风橱中进行。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。
废弃物应按照危险化学品规范处置。

本说明仅供参考，具体实验方案需结合文献与实际需求调整。