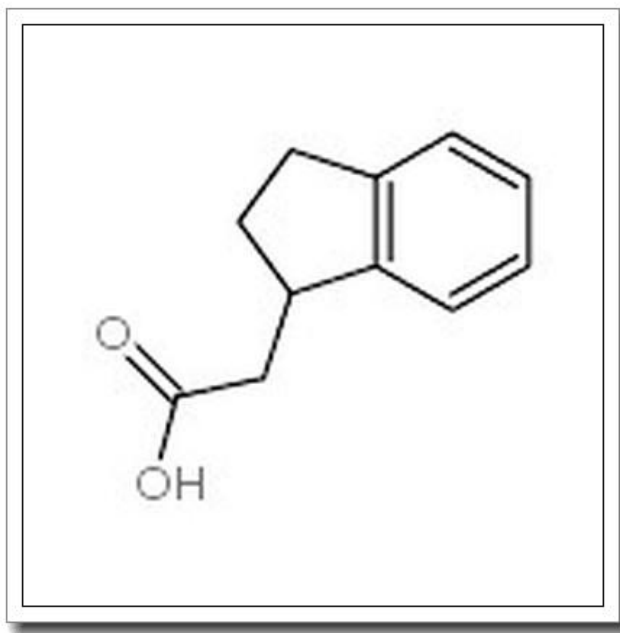


2-茛满基乙酸

2-(2,3-Dihydro-1H-inden-2-yl)acetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(2,3-Dihydro-1H-inden-2-yl)acetic acid
中文名称	2-茛满基乙酸
CAS 号	37868-26-1
分子式	C ₁₁ H ₁₂ O ₂
分子量	176.212
纯度	>96%

产品说明

2-(2,3-二氢-1H-茛-2-基)乙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(2,3-二氢-1H-茛-2-基)乙酸 (CAS 号 37868-26-1) 是一种有机羧酸化合物, 分子式为 $C_{11}H_{12}O_2$, 分子量 176.212。其结构特征为茛满骨架与乙酸基团结合, 形成具有芳香性和脂肪族双重特性的杂环酸。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 可溶于常见有机溶剂 (如甲醇、乙醇、DMSO), 微溶于水。其 pKa 值约为 4.5-5.0, 需注意在碱性条件下易形成盐类。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为茛满衍生物, 其羧酸基团赋予其配位能力和氢键形成潜力, 在生物体系中可能参与酶抑制或信号分子模拟。茛满结构常见于药物活性分子中, 使其成为研究神经递质调节 (如多巴胺受体) 和抗炎药物开发的潜在中间体。其刚性骨架与柔性侧链的组合, 在药物设计中被用于优化分子构象和靶标结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品常用于合成非甾体抗炎药 (NSAIDs) 前体或中枢神经系统药物修饰物。材料科学中可作为有机配体用于金属有机框架 (MOFs) 的构建。实验室研究中主要用于:

- 新型茛满类化合物的结构修饰
- 小分子抑制剂库的构建
- 手性催化剂开发中的辅助基团
- 分析标准品 (HPLC/LC-MS)

4. 储存条件与使用建议

推荐避光保存于 2-8°C 干燥环境中, 长期储存建议充氮密封。开封后需在干燥器内存放, 避免吸湿。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解建议优先选用 DMSO (浓度 $\leq 50\text{mM}$), 水溶液需现配现用并调节 pH 至中性。与强氧化剂、碱金属分开存放。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 归一化法检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明其具有刺激性（GHS 分类：Skin Irrit. 2），接触后需立即用大量清水冲洗。废弃物处理应遵循有机酸类化学品规范，不可直接排入下水系统。实验动物研究显示 LD50（大鼠口服） $> 2000\text{mg/kg}$ ，但仍需避免吸入粉尘或长期皮肤接触。

（注：本说明基于当前研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）