

# 2-Chloro-4-ethynylbenzoic acid

---

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-4-ethynylbenzoic acid
产品目录号	
CAS 号	2168559-67-7
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> ClO <sub>2</sub>
分子量	180.59
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-Chloro-4-ethynylbenzoic acid 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-氯-4-乙炔基苯甲酸（化学名称：2-Chloro-4-ethynylbenzoic acid）是一种有机芳香羧酸衍生物，其分子式为  $C_9H_5ClO_2$ ，分子量为 180.59。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在，CAS 号为 2168559-67-7，纯度标准 >96%。其结构特征包含氯取代基、乙炔基及羧酸官能团，赋予其独特的反应活性，尤其在交叉偶联反应和点击化学中表现出高选择性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸类化合物的衍生物，该产品可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应，同时乙炔基可作为点击化学的底物，与叠氮化合物发生环加成反应。其氯原子的存在进一步扩展了其在过渡金属催化反应（如 Suzuki 偶联）中的应用潜力。在生物化学研究中，该分子常作为合成中间体，用于构建复杂药物分子或荧光标记探针。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、材料科学及化学生物学领域。在药物化学中，它是合成激酶抑制剂和抗肿瘤化合物的关键中间体；在材料领域，可用于制备功能性高分子或金属有机框架（MOFs）；此外，其乙炔基特性使其成为生物共轭标记的理想选择，例如蛋白质或核酸的荧光标记。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光干燥储存，长期保存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮，避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作，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 DMSO 或甲醇），溶液现配现用。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 >96%，批次间质量稳定。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若不慎接触眼睛或皮肤，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。)