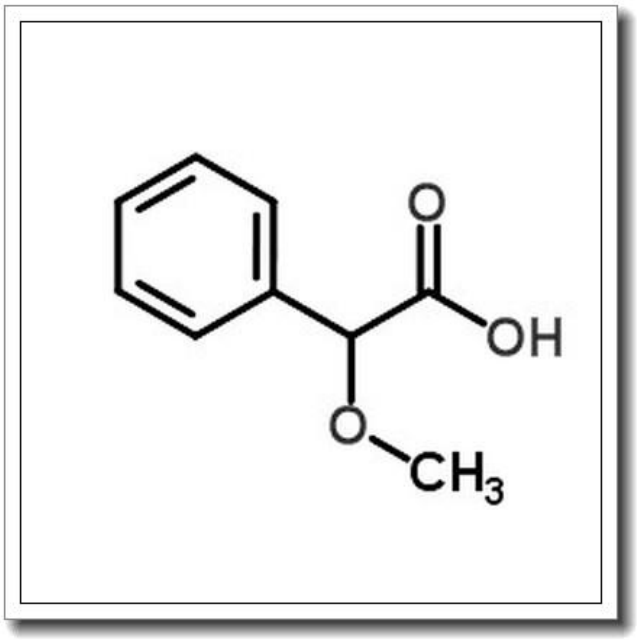
DL-α-甲氧基苯乙酸

DL-alpha-Methoxyphenylacetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	DL-alpha-Methoxyphenylacetic acid
中文名称	DL-α-甲氧基苯乙酸
CAS 号	7021-09-2
分子式	C9H1003
分子量	166.174
纯度	>96%

产品说明

DL-α-甲氧基苯乙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

DL-α-甲氧基苯乙酸（DL-alpha-Methoxyphenylacetic acid）是一种有机羧酸衍生物，化学式为C9H1003，分子量166.174，CAS登记号7021-09-2。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度>96%，具有苯环与甲氧基的协同电子效应，使其兼具亲脂性和弱酸性（pKa约3.8）。其DL构型表明为外消旋混合物，可溶于乙醇、乙醚等有机溶剂，微溶于水（25℃时溶解度<1 g/L）。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性合成砌块，该化合物通过甲氧基的空间位阻效应可调控反应立体选择性，在酶抑制研究中常用于模拟天然底物结构。其苯乙酸骨架与多种生物活性分子（如非甾体抗炎药、植物生长调节剂）的核心结构相似，在药物中间体合成和代谢通路研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药领域：用于合成β-内酰胺类抗生素侧链、α-芳基丙酸类非甾体抗炎药（如布洛芬）的前体化合物。

3.2 农药化学：作为苯氧羧酸类除草剂的结构修饰中间体。

3.3 不对称催化：外消旋体可拆分制备单一对映体催化剂配体。

3.4 科研用途：用于手性色谱分析的标准品、酶动力学研究的竞争性抑制剂。

4. 储存条件与使用建议

4.1 储存：密封保存于阴凉干燥处（建议2-8℃），避光防潮，远离氧化剂和强碱。

4.2 稳定性：常温下稳定2年，溶液现配现用（推荐用无水乙醇配制）。

4.3 操作：佩戴防尘口罩与化学防护手套，通风橱中称量，避免吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准：HPLC检测纯度≥96%，水分含量≤0.5%，残留溶剂符合ICH Q3C标

准。

5.2 安全数据：GHS 分类为刺激性（Category 2），接触眼睛可能引起红肿，误食需立即就医（LD50 大鼠经口>2000 mg/kg）。

5.3 废弃物处理：按危险化学品处置，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用需结合具体实验方案调整。）