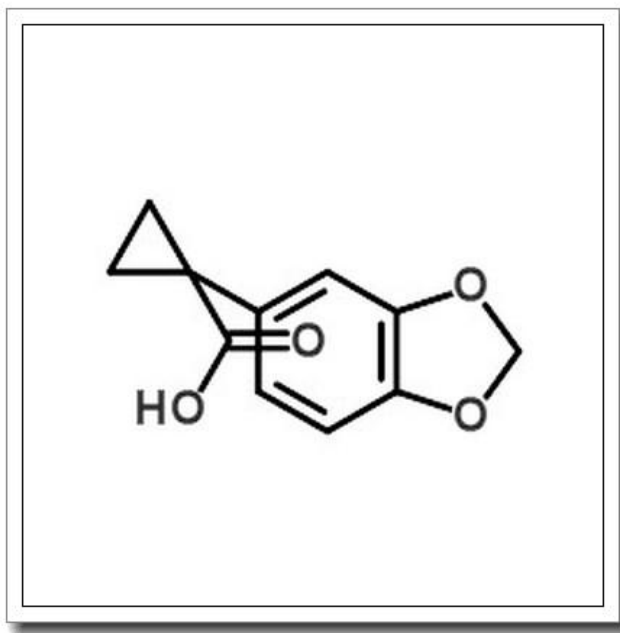


1-(1,3-苯并二氧代 1-5-基)环丙烷羧酸

1-(1,3-benzodioxol-5-yl)cyclopropane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(1,3-benzodioxol-5-yl)cyclopropane-1-carboxylic acid
中文名称	1-(1,3-苯并二氧代 1-5-基)环丙烷羧酸
CAS 号	862574-89-8
分子式	C ₁₁ H ₁₀ O ₄
分子量	206.195
纯度	>96%

产品说明

1-(1,3-苯并二氧代-5-基)环丙烷羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 1-(1,3-benzodioxol-5-yl)cyclopropane-1-carboxylic acid, CAS 号为 862574-89-8, 分子式为 C₁₁H₁₀O₄, 分子量为 206.195。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%。其结构特征为苯并二氧戊环与环丙烷羧酸基团结合, 具有独特的刚性环状构象和极性官能团, 使其在有机溶剂(如甲醇、乙醇、DMSO)中具有中等溶解性, 而在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为含苯并二氧戊环的环丙烷衍生物, 该化合物在药物化学和生物活性分子设计中具有重要价值。环丙烷结构的张力环可增强与靶标蛋白的结合能力, 而羧酸基团提供了进一步结构修饰的位点。其苯并二氧戊环部分可能参与 $\pi-\pi$ 堆积相互作用, 影响化合物的代谢稳定性和细胞渗透性。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体和生物活性分子研发领域。具体用途包括: 作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的核心骨架; 用于构建神经保护剂或抗炎药物的先导化合物; 在农药化学中用于开发新型植物生长调节剂。实验研究表明, 类似结构分子在抗肿瘤和抗癫痫药物筛选中表现出潜在活性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 2-8°C 环境。开封后需充入惰性气体保护, 避免反复冻融。使用前需平衡至室温并充分溶解于适宜溶剂。推荐工作浓度为 1-10 mM (需根据具体实验体系优化), 处理时需佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 安全数据表 (SDS) 编号为 CHEM-862574-89-8-2023。

如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟；若吸入粉尘，应转移至空气新鲜处。
废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定。

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗用途。使用者应具备专业化学品操作资质，并严格遵守实验室安全规程。