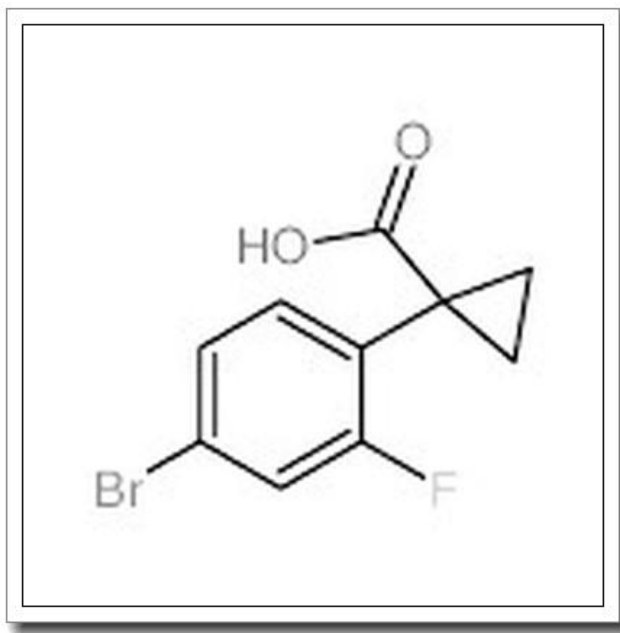


1-(4-溴-2-氟苯基)环丙甲酸

1-(4-bromo-2-fluorophenyl)cyclopropane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(4-bromo-2-fluorophenyl)cyclopropane-1-carboxylic acid
中文名称	1-(4-溴-2-氟苯基)环丙甲酸
CAS 号	872422-15-6
分子式	C ₁₀ H ₈ BrF ₀₂
分子量	259.072
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(4-溴-2-氟苯基)环丙甲酸 (CAS 号: 872422-15-6) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{10}H_8BrFO_2$, 分子量为 259.072。该化合物由苯环、环丙基和羧酸基团构成, 其中苯环上带有溴和氟取代基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻。其纯度高于 96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末。该化合物在有机溶剂 (如甲醇、乙醇、二甲基亚砜) 中具有较好的溶解性, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

1-(4-溴-2-氟苯基)环丙甲酸是一种重要的医药中间体, 其结构中的溴和氟原子可显著增强化合物的生物活性和代谢稳定性。环丙基的引入进一步提高了分子的刚性, 使其在药物设计中具有潜在的应用价值。该化合物常用于构建更复杂的分子骨架, 特别是在开发抗炎、抗肿瘤和中枢神经系统药物中发挥关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于药物研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为关键中间体用于合成小分子抑制剂或受体调节剂; 在偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 中作为溴代芳烃的前体; 用于研究构效关系, 优化先导化合物的活性与选择性。此外, 它还可用于材料科学中功能分子的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氮气) 环境中以保持稳定性。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风良好的环境下佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议使用干燥的有机溶剂, 并避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测确保纯度 $>96\%$, 并提供详细的核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 分析报告。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应

严格遵守化学品安全操作规程。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品处理规范处置。