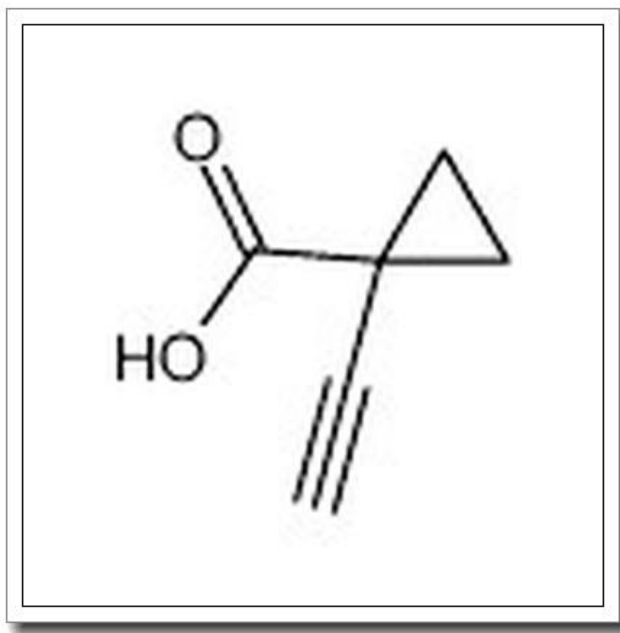


1-乙炔-环丙烷羧酸

1-ethynylcyclopropane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-ethynylcyclopropane-1-carboxylic acid
中文名称	1-乙炔-环丙烷羧酸
CAS 号	933755-97-6
分子式	C ₆ H ₆ O ₂
分子量	110.111
纯度	>96%

产品说明

1-乙炔-环丙烷羧酸产品说明书

产品概述与化学特性

1-乙炔-环丙烷羧酸 (1-Ethynylcyclopropane-1-carboxylic acid, CAS 号 933755-97-6) 是一种含炔基和羧基的环丙烷衍生物, 分子式为 $C_6H_6O_2$, 分子量 110.111。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有独特的环丙烷刚性结构和炔基反应活性, 可参与点击化学、偶联反应等有机合成。其羧酸基团进一步扩展了其在修饰与衍生化中的应用潜力。

生物化学功能与重要性

作为小分子砌块, 1-乙炔-环丙烷羧酸在药物化学和材料科学中具有重要价值。其环丙烷结构可增强分子刚性, 炔基可作为生物正交反应的标记位点, 而羧酸基团便于与氨基或羟基形成酰胺或酯键。这些特性使其成为 PROTAC 分子设计、荧光探针合成及金属有机框架材料修饰的理想中间体。

主要应用领域与具体用途

1. 药物研发: 用于激酶抑制剂或抗肿瘤药物的结构优化, 通过环丙烷骨架改善代谢稳定性。
2. 化学生物学: 作为探针分子, 通过炔基与叠氮化物的点击化学反应实现生物分子标记。
3. 材料科学: 参与合成功能性高分子材料或 MOFs 材料, 调节材料表面性质。
4. 农业化学: 作为农药中间体, 引入环丙烷结构以增强活性化合物的环境耐受性。

储存条件与使用建议

本品需密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强氧化剂或重金属接触。溶解性测试表明, 其易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇, 水溶性较差。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，批次间一致性控制在±1%。安全数据表明，其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若接触皮肤，需立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，建议通过专业危废机构处理。

（注：本说明书基于现有实验数据编写，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）