

1-(4-chloro-2-fluorophenyl)cyclopropane-1-carbonitrile

1-(4-chloro-2-fluorophenyl)cyclopropane-1-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(4-chloro-2-fluorophenyl)cyclopropane-1-carbonitrile
中文名称	1-(4-氯-2-氟苯基)环丙烷-1-碳腈
CAS 号	1260750-70-6
分子式	C ₁₀ H ₇ ClFN
分子量	195.62
纯度	>96%

产品说明

1-(4-氯-2-氟苯基)环丙烷-1-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-(4-chloro-2-fluorophenyl)cyclopropane-1-carbonitrile, CAS 号为 1260750-70-6, 分子式为 C₁₀H₇ClFN, 分子量为 195.62。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经高效液相色谱 (HPLC) 测定大于 96%。其结构中含氟、氯取代基及环丙烷甲腈基团, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性, 适合作为有机合成中间体或药物研发中的关键砌块。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其苯环上的卤素取代 (氟、氯) 和环丙烷甲腈基团, 表现出显著的生物活性潜力。氟原子的引入可增强脂溶性和代谢稳定性, 而环丙烷结构能调节分子构象, 使其在药物化学中常用于优化先导化合物的药代动力学性质。其甲腈基团可作为氢键受体, 参与靶标蛋白的相互作用, 因此在激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中, 它是构建抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的重要中间体。例如, 可用于合成含氟杂环类化合物, 或作为 PD-1/PD-L1 抑制剂类药物的前体。在材料科学中, 其刚性环丙烷结构可用于设计高性能液晶材料或光敏分子。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 保护。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该产品易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和丙酮, 微溶于甲醇, 不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过核磁共振 (NMR)、质谱 (MS) 及 HPLC 进行严格质量控制, 确保批次间

一致性。安全数据表明，其急性毒性（LD50）需参考具体实验数据，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若意外接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置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，具体应用需进一步实验验证。