

2,2-二氟-1-(邻甲苯基)环丙烷-1-羧酸

2,2-Difluoro-1-o-tolyl-cyclopropanecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,2-Difluoro-1-o-tolyl-cyclopropanecarboxylic acid
中文名称	2,2-二氟-1-(邻甲苯基)环丙烷-1-羧酸
CAS 号	1774902-99-6
分子式	C ₁₁ H ₁₀ F ₂ O ₂
分子量	212.19
纯度	>96%

产品说明

2, 2-二氟-1-(邻甲苯基)环丙烷-1-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2, 2-二氟-1-(邻甲苯基)环丙烷-1-羧酸 (CAS 号: 1774902-99-6) 是一种含氟环丙烷羧酸衍生物, 分子式为 $C_{11}H_{10}F_2O_2$, 分子量 212.19。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有独特的环丙烷骨架和邻甲苯基取代基, 其分子中的二氟修饰显著增强了化学稳定性和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟有机化合物, 该产品在药物化学和材料科学中具有重要价值。氟原子的引入可调节分子的脂溶性、代谢稳定性和靶标结合能力, 使其成为药物设计中的关键中间体。其环丙烷结构可提供空间位阻效应, 常用于构建手性中心或刚性分子骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发领域, 尤其作为抗病毒、抗肿瘤或抗炎药物的合成前体。在农用化学品中, 可用于开发新型含氟农药。此外, 在材料科学中可作为功能单体参与高性能聚合物的合成。具体用途包括但不限于: 蛋白酶抑制剂的结构优化、氟代芳烃类化合物的衍生化反应、以及生物活性分子的结构修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需干燥环境下使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 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)、甲醇等有机溶剂, 水溶性较低, 建议先用极性有机溶剂配制母液后再稀释使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间一致性通过 1H NMR 和质谱验证。安全数据表明, 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴防护手套、护目镜及实验

服。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验体系进一步验证。）