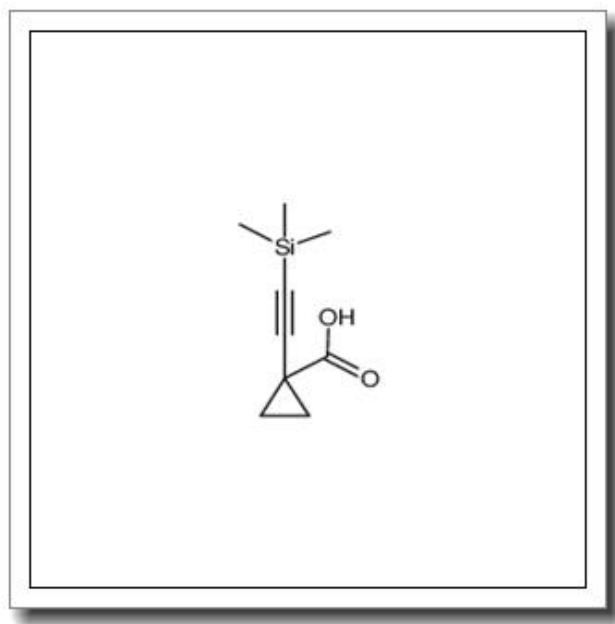


1- [(trimethylsilyl)ethynyl]cyclopropanecarboxylic acid

1-[(trimethylsilyl)ethynyl]cyclopropanecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1- [(trimethylsilyl)ethynyl]cyclopropanecarboxylic acid
中文名称	1- [(trimethylsilyl)ethynyl]cyclopropanecarboxylic acid
CAS 号	1268810-07-6
分子式	C ₉ H ₁₄ O ₂ Si
分子量	182.292
纯度	≥96%

产品说明

1-[(三甲基硅基) 乙炔基] 环丙烷羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-[(三甲基硅基) 乙炔基] 环丙烷羧酸 (1-[(trimethylsilyl) ethynyl] cyclopropanecarboxylic acid), CAS 号为 1268810-07-6, 分子式为 C₉H₁₄O₂Si, 分子量 182.292。其为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 兼具环丙烷刚性结构和三甲基硅基乙炔的活性官能团, 在有机合成中表现出独特的空间位阻效应与反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为高价值合成砌块, 其羧基可参与酯化、酰胺化等反应, 而三甲基硅基保护的乙炔基在脱保护后能用于点击化学 (如 CuAAC 反应) 或交叉偶联反应。环丙烷骨架的张力环结构使其成为药物设计中修饰生物活性的关键片段, 尤其在抗病毒和抗肿瘤先导化合物开发中具有潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品常用于构建含环丙烷结构的靶向分子库, 例如用于蛋白酶抑制剂或 GPCR 配体的优化。材料科学中, 其可作为功能单体参与聚合物改性, 赋予材料特殊光电性能。此外, 在有机方法学研究中, 该化合物是探索环丙烷开环/官能化反应的理想模型底物。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 惰性气体 (如氩气) 环境中, 避免光照与湿气。使用前需恢复至室温并干燥处理, 防止硅基水解。反应体系中建议严格除氧, 若需脱除三甲基硅基, 可采用氟化物 (如 TBAF) 温和处理。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次纯度验证, 残留溶剂符合 ICH 标准。本品对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地环保法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 具体应用需结合实验条件验证。)