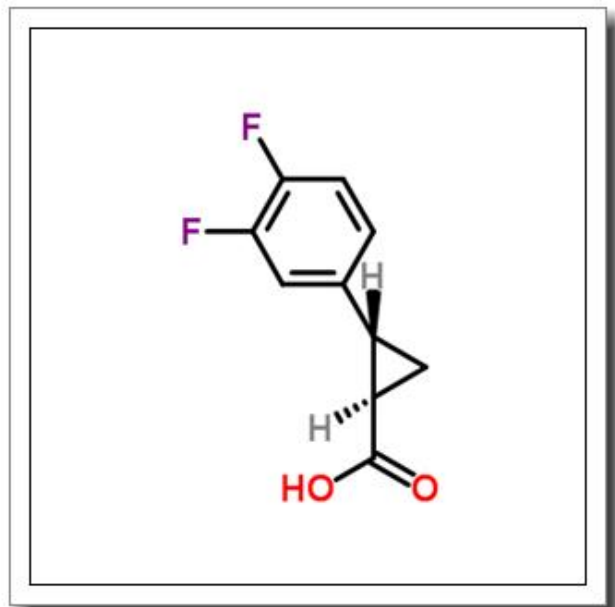


(1R,2S)-rel-2-(3,4-二氟苯基)环丙基甲酸

(1R, 2R)-2-(3, 4-difluorophenyl)cyclopropane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 2R)-2-(3, 4-difluorophenyl)cyclopropane-1-carboxylic acid
中文名称	(1R, 2S)-rel-2-(3, 4-二氟苯基)环丙基甲酸
CAS 号	220352-36-3
分子式	C ₁₀ H ₈ F ₂ O ₂
分子量	198.166
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(1R, 2R)-2-(3, 4-二氟苯基)环丙烷-1-羧酸 (CAS 号: 220352-36-3) 是一种高纯度有机氟化合物, 分子式为 $C_{10}H_8F_2O_2$, 分子量为 198.166。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的立体构型 ((1R, 2R)-构型), 纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中含有一个环丙烷核心和 3, 4-二氟苯基取代基, 羧酸官能团赋予其酸性特征, 使其易于形成盐或酯类衍生物。该化合物在极性有机溶剂 (如甲醇、乙醇、DMSO) 中具有中等溶解性, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性环丙烷衍生物, 该化合物在药物化学中具有重要价值。环丙烷结构能够模拟肽键的刚性构象, 而二氟苯基的引入可调节分子的亲脂性和代谢稳定性。其羧酸基团可作为药效团或进一步修饰的位点, 常用于设计酶抑制剂或受体调节剂。在生物活性分子研发中, 此类结构常作为关键中间体用于构建具有抗炎、抗肿瘤或中枢神经系统活性的候选药物。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发领域, 具体用途包括:

- 1) 作为手性合成子用于构建复杂药物分子, 尤其是靶向 GPCRs (G 蛋白偶联受体) 或激酶的化合物;
- 2) 在抗病毒或抗菌药物开发中作为结构模块, 例如用于 HIV 整合酶抑制剂的优化;
- 3) 作为荧光探针或标记物的前体, 利用其苯环的氟原子特性进行同位素标记研究;
- 4) 在不对称催化反应中作为配体或底物, 用于立体选择性合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存于干燥环境中, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。开封后应密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛 (如氩气手套箱) 中

操作，若需溶解推荐使用无水 DMSO 或乙醇，并超声辅助溶解。工作浓度应根据实验体系优化，建议先进行小剂量溶解性测试。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保立体化学纯度和化学纯度符合标准。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，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，避免直接排放至环境中。

（注：实际应用中需结合具体实验目的查阅最新文献，以确认其适用性和安全性。）