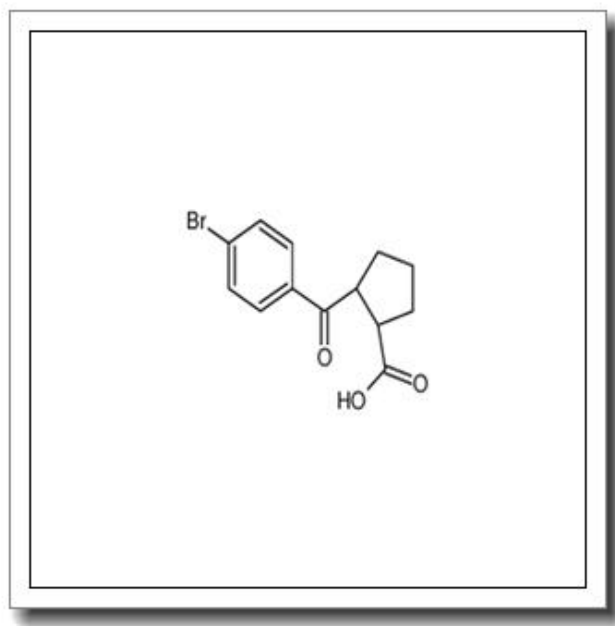


(1S,2S)-2-(4-bromobenzoyl)cyclopentane-1-carboxylic acid

(1S, 2S)-2-(4-bromobenzoyl)cyclopentane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1S, 2S)-2-(4-bromobenzoyl)cyclopentane-1-carboxylic acid
中文名称	(1S, 2S)-2-(4-bromobenzoyl)cyclopentane-1-carboxylic acid
CAS 号	959123-24-1
分子式	C ₁₃ H ₁₃ BrO ₃
分子量	297.145
纯度	≥96%

产品说明

(1S, 2S)-2-(4-溴苯甲酰基)环戊烷-1-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(1S, 2S)-2-(4-bromobenzoyl)cyclopentane-1-carboxylic acid, CAS 号 959123-24-1, 分子式 C₁₃H₁₃BrO₃, 分子量 297.145。其结构中包含手性环戊烷骨架与 4-溴苯甲酰基团，具有明确的立体构型 (1S, 2S)。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，熔点为 185-188° C, 易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体，在不对称合成中表现出显著的空间选择性。溴苯甲酰基团赋予其亲电反应活性，而羧酸基团可通过酯化或酰胺化进一步衍生化。其立体特异性使其成为构建复杂药物分子（如前列腺素类似物或神经调节剂）的关键砌块，尤其在靶向酶抑制或受体调节研究中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发与有机合成领域：

- 作为手性催化剂或配体的前体，用于不对称碳-碳键形成反应
- 用于合成抗炎、抗肿瘤等生物活性分子的结构修饰
- 在学术研究中作为探针分子，研究酶促反应机制或蛋白质相互作用

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装使用以避免吸湿。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防化手套与护目镜。溶解时优先选用 DMSO（浓度 ≤10 mM），水溶液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次一致性验证，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：急性毒性（口服 LD₅₀）>500 mg/kg（大鼠），皮肤刺激性类别 3。废弃物处理需遵循危险化学品法规。MSDS 可随货提供，详细记载 GHS 分类及应急处理措施。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。