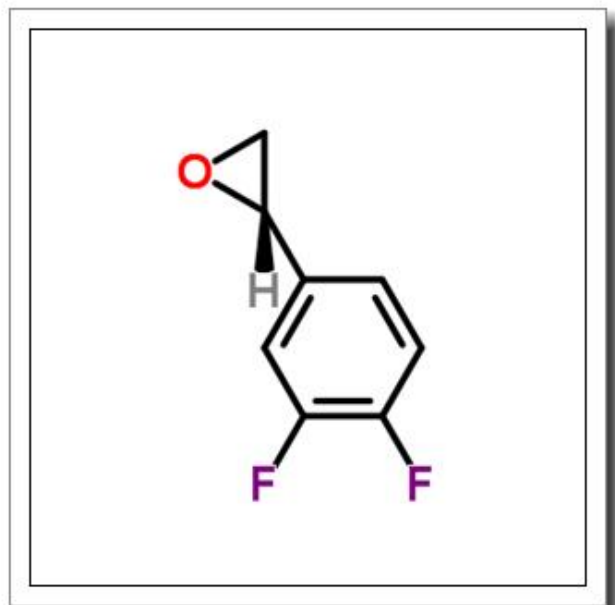


(2S)-2-(3,4-Difluorophenyl)oxirane

(2S)-2-(3,4-Difluorophenyl)oxirane



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-2-(3,4-Difluorophenyl)oxirane
中文名称	(2S)-2-(3,4-Difluorophenyl)oxirane
CAS 号	1006376-63-1
分子式	C ₈ H ₆ F ₂ O
分子量	156.129
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S)-2-(3,4-二氟苯基)环氧乙烷 (CAS 号: 1006376-63-1) 是一种手性环氧乙烷衍生物, 分子式为 $C_8H_6F_2O$, 分子量为 156.129。该化合物以单一对映体形式存在 ((2S)-构型), 纯度 $\geq 96\%$, 常温下为无色至淡黄色液体。其结构中含有一个环氧乙烷环和 3,4-二氟苯基, 具有高反应活性和立体选择性, 是合成手性药物及精细化学品的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性环氧乙烷类化合物, 该产品可通过开环反应与亲核试剂 (如胺类、硫醇类) 特异性结合, 形成 β -取代醇结构。其 3,4-二氟苯基赋予分子独特的电子效应和空间位阻, 在药物设计中常用于调节化合物的脂溶性、代谢稳定性和靶标结合能力。在生物活性分子合成中, 该结构单元对 α -肾上腺素受体调节剂、抗抑郁药物等研发具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药中间体合成, 具体包括:

- 1) 手性 β -受体阻滞剂前体的不对称合成
- 2) 抗真菌药物氟康唑衍生物的构建
- 3) 农用杀菌剂中苯氧基丙醇结构的制备
- 4) 作为荧光探针修饰基团用于生物标记研究

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 温度控制在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$, 避光防潮。开封后建议一次性使用完毕, 若需分次使用, 需严格隔绝空气和水分。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防化手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于丙酮、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性低 ($< 0.1 g/L$)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC (面积归一化法) 检测纯度 $\geq 96\%$, 手性纯度 ee 值 $\geq 99\%$ 。GC-MS

和 ^1H NMR 用于结构确证。安全数据表明其具有刺激性 (GHS 分类: Skin Irrit. 2), 避免直接接触皮肤和眼睛。若发生泄漏, 需用惰性吸附材料处理并按规定处置废弃物。运输时按普通化学品分类, UN 编号未作特别规定。

注: 具体应用前请查阅最新文献资料, 建议小试优化反应条件后再放大生产。