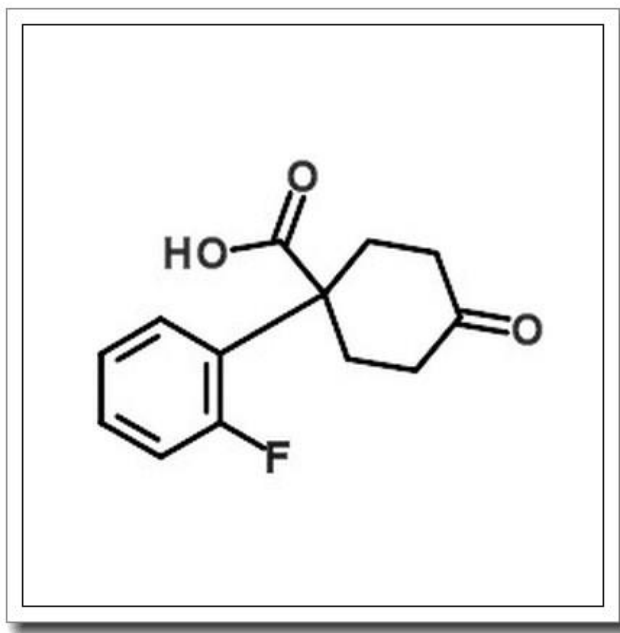


1-(2-氟苯基)-4-氧代环己烷甲酸

1-(2-fluorophenyl)-4-oxocyclohexanecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(2-fluorophenyl)-4-oxocyclohexanecarboxylic acid
中文名称	1-(2-氟苯基)-4-氧代环己烷甲酸
CAS 号	179064-49-4
分子式	C ₁₃ H ₁₃ F ₃ O ₃
分子量	236.239
纯度	>96%

产品说明

1-(2-氟苯基)-4-氧代环己烷甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-(2-氟苯基)-4-氧代环己烷甲酸（英文名称：1-(2-fluorophenyl)-4-oxocyclohexanecarboxylic acid）是一种有机氟化合物，CAS 号为 179064-49-4，分子式为 C₁₃H₁₃F₀₃，分子量为 236.239。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%，具有典型的羧酸和酮基官能团特性，可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。其结构中含有的氟苯基团和环己酮骨架使其在药物化学和材料科学领域具有重要应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为中间体在生物活性分子合成中发挥关键作用，尤其是作为构建含氟杂环化合物的前体。氟原子的引入可显著改善母体分子的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性，因此在药物设计中被广泛用于优化药代动力学性质。其环己酮羧酸结构还可作为手性合成子，用于不对称催化反应。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，特别是作为非甾体抗炎药（NSAIDs）、抗抑郁药及中枢神经系统药物合成的关键中间体。在材料科学中，可用于制备含氟液晶单体或高分子材料改性剂。实验室用途包括：有机氟化学研究、酶抑制剂开发、以及作为核磁共振（NMR）分析的标准品。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于密闭容器中，置于-20℃干燥避光环境，惰性气体保护可延长稳定性。开封后需充氮保存，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用预冷的有机溶剂，水溶液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度，批号关联的 COA 提供详细质检数据（包括水分、残留溶剂及重金属含量）。该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，安全术语 S26/S36 标明需立即冲

洗接触部位。废弃物处理应遵守当地危险化学品管理条例，不可直接排入下水系统。运输分类为非危险品，但建议按一般化学品规范包装。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验方案调整。产品规格以实际检测报告为准。）