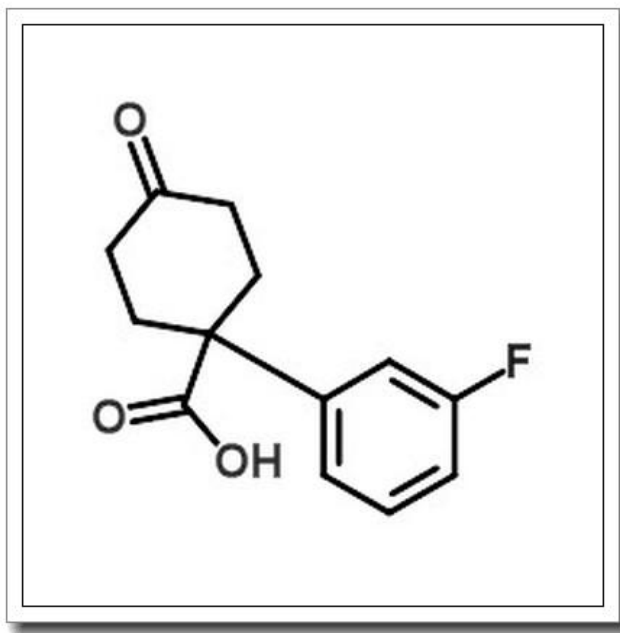


1-(3-氟苯基)-4-氧代环己烷甲酸甲酯

1-(3-fluorophenyl)-4-oxocyclohexanecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3-fluorophenyl)-4-oxocyclohexanecarboxylic acid
中文名称	1-(3-氟苯基)-4-氧代环己烷甲酸甲酯
CAS 号	374795-89-8
分子式	C ₁₃ H ₁₃ F ₀₃
分子量	236. 239
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(3-氟苯基)-4-氧代环己烷甲酸甲酯 (CAS 号: 374795-89-8) 是一种有机氟化合物, 分子式为 $C_{13}H_{13}F_3O_3$, 分子量为 236.239。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度高于 96%。其结构特征为环己烷骨架上的 4-氧代基团与 3-氟苯基取代基, 兼具芳香族和脂环族特性, 表现出良好的溶解性于常见有机溶剂 (如甲醇、乙醇、DMSO 等)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为环己烷衍生物, 其氟苯基结构赋予其独特的电子效应和空间位阻, 可能影响与其他生物分子的相互作用。在药物化学领域, 此类结构常作为中间体用于合成具有生物活性的分子, 尤其是靶向神经系统或代谢途径的候选药物。其氧代环己烷部分可能参与氢键形成, 增强与酶或受体的结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

1-(3-氟苯基)-4-氧代环己烷甲酸甲酯主要用于医药研发和有机合成。具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成抗抑郁、抗焦虑等中枢神经系统药物。
- 在材料科学中用于制备含氟高分子单体, 改善材料的热稳定性和化学惰性。
- 在学术研究中作为探针分子, 用于研究氟原子对药物代谢动力学的影响。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于密闭容器中, 储存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 以防氧化。溶解时优先选择无水溶剂, 并确保操作环境通风良好。长期储存建议定期检测纯度。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测确认纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (质量分析证书)。安全信息如下:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。

- 避免吸入粉尘或接触皮肤，如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物需按危险化学品规范处置，不可直接排放至环境中。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验需求进一步验证。