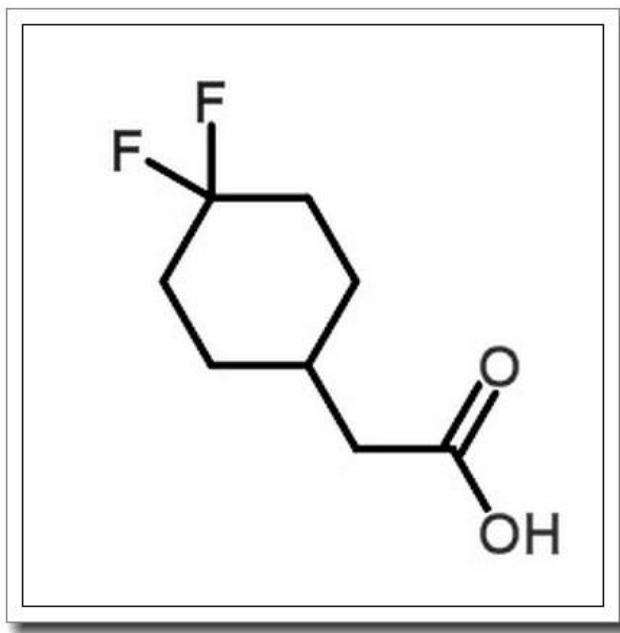


(4,4-二氟环己基)乙酸

2-(4,4-Difluorocyclohexyl)acetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(4,4-Difluorocyclohexyl)acetic acid
中文名称	(4,4-二氟环己基)乙酸
CAS 号	915030-40-9
分子式	C ₈ H ₁₂ F ₂ O ₂
分子量	178.176
纯度	>96%

产品说明

2-(4,4-二氟环己基)乙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(4,4-二氟环己基)乙酸 (化学名称: 2-(4,4-Difluorocyclohexyl)acetic acid) 是一种含氟有机化合物, CAS 号为 915030-40-9, 分子式为 $C_8H_{12}F_2O_2$, 分子量为 178.176。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中的二氟环己基与乙酸基团赋予其独特的极性和稳定性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其含氟特性表现出显著的代谢稳定性和脂溶性, 能够增强分子在生物体内的穿透性和靶向性。其羧酸基团可作为关键反应位点, 参与酯化、酰胺化等反应, 常用于构建药物活性分子的核心骨架。在生物活性分子设计中, 二氟环己基结构常被用于调节化合物的构象和电子效应, 从而优化其药理性能。

3. 主要应用领域与具体用途

2-(4,4-二氟环己基)乙酸广泛应用于医药研发和精细化工领域。在药物化学中, 它是合成抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的重要中间体。此外, 还可用于材料科学中功能高分子单体的制备, 或作为配体用于催化反应。其高纯度特性使其特别适用于对杂质敏感的合成步骤。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光的环境中, 推荐储存温度为 2-8°C, 长期存放建议充入惰性气体保护。使用时应避免与强氧化剂或强碱接触, 操作需在通风良好的环境下进行, 并佩戴防护手套和护目镜。开封后建议尽快使用, 剩余物料需重新密封以防止吸潮或降解。

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, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有轻微刺激性, 操作时应遵循化学品通用防护规

范。如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）