

(1r,1'r,4S,4'S)-4-(2,3-Difluoro-4-methylphenyl)-4'-ethyl-1,1'-bi(cyclohexyl)

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(1r, 1' r, 4S, 4' S)-4-(2, 3-Difluoro-4-methylphenyl)-4' -ethyl-1, 1' -bi (cyclohexyl)
产品目录号	
CAS 号	174350-08-4
分子式	C ₂₁ H ₃₀ F ₂
分子量	320. 46
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(1r, 1' r, 4S, 4' S)-4-(2, 3-二氟-4-甲基苯基)-4'-乙基-1, 1'-联环己烷, 化学式为 C₂₁H₃₀F₂, 分子量 320.46, CAS 号 174350-08-4。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 验证大于 96%, 呈白色至类白色结晶或粉末状。该化合物具有手性中心, 立体构型明确, 属于联环己烷衍生物, 其结构中含二氟苯基和乙基取代基, 赋予其独特的疏水性和立体选择性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可作为高选择性配体或中间体, 用于调控特定生物分子相互作用。其联环己烷骨架提供刚性结构, 而二氟苯基增强与靶标蛋白的亲合力, 在药物化学中常用于设计酶抑制剂或受体调节剂。其手性特征对立体选择性反应至关重要, 尤其在不对称合成和手性药物开发领域具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为关键中间体合成抗肿瘤或抗炎药物; 用于手性催化剂配体的制备; 在材料科学中构建液晶分子结构。其氟原子取代特性使其在 PET (正电子发射断层扫描) 示踪剂开发中也有潜在应用。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光保存, 置于干燥惰性气体环境中。开封后需充氮密封, 防止吸湿和氧化。使用前需恢复至室温并充分干燥。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 建议在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构, 批次间一致性可控。安全数据表明其急性毒性较低, 但仍需佩戴防护手套和护目镜操作。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理, 遵守当地环保法规。

注: 以上信息基于实验室测试数据, 实际应用需结合具体实验条件优化。