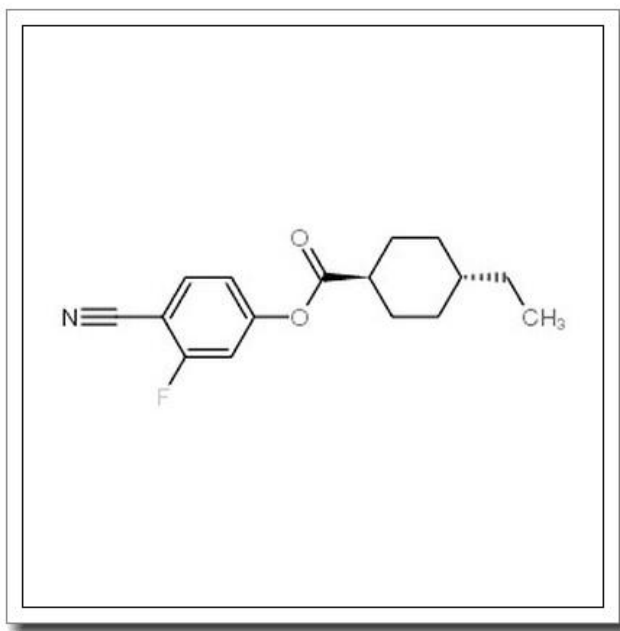


反式-4-乙基环己烷羧酸-4-氰基-3-氟苯酯

(4-cyano-3-fluorophenyl) 4-ethylcyclohexane-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-cyano-3-fluorophenyl) 4-ethylcyclohexane-1-carboxylate
中文名称	反式-4-乙基环己烷羧酸-4-氰基-3-氟苯酯
CAS 号	90525-56-7
分子式	C ₁₆ H ₁₈ FN ₂ O ₂
分子量	275.318
纯度	>96%

产品说明

4-乙基环己烷羧酸-4-氰基-3-氟苯酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(4-cyano-3-fluorophenyl) 4-ethylcyclohexane-1-carboxylate, 中文系统命名为反式-4-乙基环己烷羧酸-4-氰基-3-氟苯酯, CAS 号为 90525-56-7。其分子式为 C₁₆H₁₈FN₂O₂, 分子量 275.318, 是一种具有特定立体构型的环己烷羧酸酯衍生物。产品以白色至类白色结晶粉末形式提供, 纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 其结构中含氰基、氟苯基及乙基环己烷等活性基团, 赋予其独特的极性和空间位阻效应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多功能生化中间体, 其氰基可参与亲核加成反应, 氟原子的强电负性使其成为电子 withdrawing 基团, 显著影响苯环电子云密度。乙基环己烷结构提供疏水骨架, 使其在跨膜传输和脂溶性调节中具有潜在应用价值。这些特性使其在药物设计 (尤其是中枢神经系统靶向药物) 和酶抑制剂开发中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 具体包括:

- 3.1 作为抗抑郁剂和抗焦虑药物合成的关键中间体
- 3.2 用于构建 GABA 受体调节剂的苯酯结构单元
- 3.3 在有机荧光探针开发中作为氟化标记物前体
- 3.4 作为液晶材料的功能性单体组分

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避免光照和湿度。开封后建议分装使用, 剩余物料需充氮密封。溶解性测试表明其在 DMSO 中溶解度 > 50mg/mL, 使用前需平衡至室温并超声助溶。实验操作应在通风橱中进行, 避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度通过 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 控制, 单杂 \leq 0.5%。MS 和 ^1H NMR 用于结构确证。安全数据: 急性毒性 (口服, 大鼠) $\text{LD}_{50} > 500\text{mg/kg}$, 皮肤刺激性类别 3。操作时需佩戴护目镜和丁腈手套, 若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置, 符合当地环保法规。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验验证。产品规格可能因批次调整, 请以随货 COA 为准。)