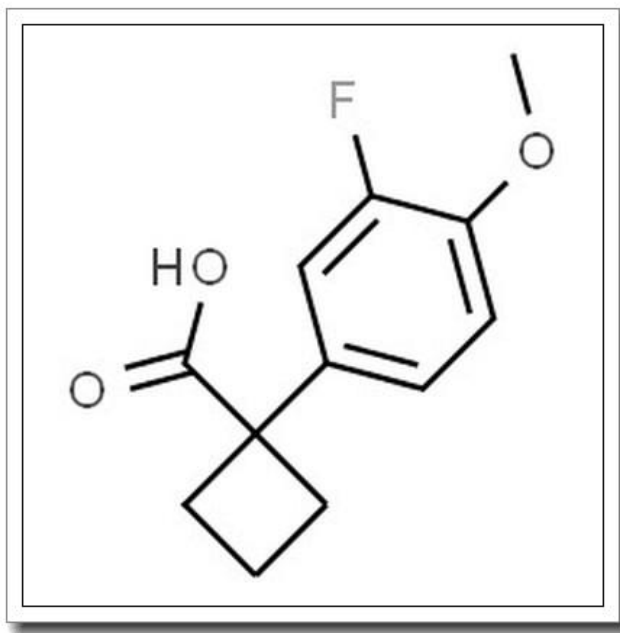


1-(3-氟-4-甲氧基苯基)环丁烷甲酸

1-(3-Fluoro-4-methoxyphenyl)cyclobutanecarboxylic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3-Fluoro-4-methoxyphenyl)cyclobutanecarboxylic Acid
中文名称	1-(3-氟-4-甲氧基苯基)环丁烷甲酸
CAS 号	1314709-48-2
分子式	C ₁₂ H ₁₃ F ₀₃
分子量	224. 23
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(3-氟-4-甲氧基苯基)环丁烷甲酸 (CAS 号: 1314709-48-2) 是一种含氟芳香族环丁烷羧酸衍生物, 分子式为 $C_{12}H_{13}F_2O_3$, 分子量为 224.23。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有明确的化学结构和稳定的物理化学性质。其结构中包含氟原子和甲氧基团, 赋予其独特的电子效应和空间位阻, 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

该化合物作为中间体或结构单元, 在生物活性分子的设计与合成中表现出显著潜力。氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性和脂溶性, 而环丁烷骨架则能调节分子构象和刚性。这些特性使其在药物研发中常用于优化先导化合物的药代动力学性质, 例如提高靶标亲和力或改善血脑屏障穿透性。

3. 主要应用领域与具体用途

1-(3-氟-4-甲氧基苯基)环丁烷甲酸主要用于医药和农药领域的研究与开发。在医药领域, 它可作为合成抗炎、抗肿瘤或中枢神经系统药物 (如激酶抑制剂或 GPCR 调节剂) 的关键中间体。在农药化学中, 其结构特征可用于设计新型杀虫剂或除草剂。此外, 该化合物也适用于材料科学中功能性分子的构建。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、避光的低温环境中 ($2-8^{\circ}C$), 避免与强氧化剂或强酸强碱接触。使用时需在通风良好的实验室环境下操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 部分溶于水, 可根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $\geq 96\%$, 并提供完整的质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 数据以支持结构鉴定。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激

性，操作时应避免直接接触。如不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

以上信息基于现有研究数据提供，具体应用需结合实验条件进一步验证。