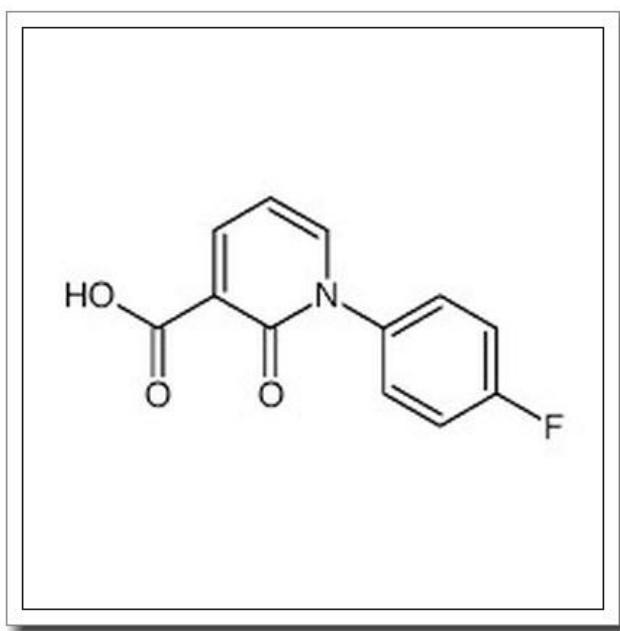


1-(4-氟苯基)-2-氧代-1,2-二氢吡啶-3-羧酸

1-(4-fluorophenyl)-2-oxopyridine-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(4-fluorophenyl)-2-oxopyridine-3-carboxylic acid
中文名称	1-(4-氟苯基)-2-氧代-1,2-二氢吡啶-3-羧酸
CAS 号	868171-67-9
分子式	C ₁₂ H ₈ FN ₃ O ₃
分子量	233.195
纯度	>96%

产品说明

1-(4-氟苯基)-2-氧代-1,2-二氢吡啶-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 1-(4-fluorophenyl)-2-oxopyridine-3-carboxylic acid，分子式 C₁₂H₈FN₃O₃，分子量 233.195，CAS 登记号 868171-67-9。其结构中含氟苯基与吡啶酮羧酸基团，赋予其独特的电子效应和配位能力。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于极性有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水（25℃时溶解度 < 0.1 mg/mL）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环羧酸衍生物，可通过羧基与金属离子或生物分子形成氢键，其吡啶酮结构可参与电子转移反应。氟原子的引入增强了代谢稳定性和膜穿透性，在药物化学中常作为酶抑制剂或受体调节剂的中间体，尤其在抗炎、抗肿瘤靶点研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 3.1 作为合成 EGFR 抑制剂、COX-2 抑制剂等小分子药物的关键砌块
- 3.2 用于金属有机框架（MOF）材料的配体设计
- 3.3 在荧光探针开发中作为信号基团载体
- 3.4 学术研究：用于激酶活性测定、分子对接实验等

4. 储存条件与使用建议

储存条件：密封避光，置于 -20℃ 干燥环境中，长期保存建议充氮保护。开封后需在干燥器内存放，避免吸湿。

使用建议：

- 4.1 称量时需通风橱中操作，避免粉尘吸入
- 4.2 溶解推荐使用预脱气的 DMSO（浓度 ≤ 10 mM）
- 4.3 水溶液体系需调节 pH 至 7-8 以增强稳定性

5. 质量控制与安全信息

质量控制：每批次提供 HPLC 图谱、质谱及核磁数据（ $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ NMR）。残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：

5.1 GHS 分类：皮肤刺激（Category 2）、眼刺激（Category 2A）

5.2 防护措施：佩戴护目镜、丁腈手套及防尘口罩

5.3 应急处理：皮肤接触时立即用肥皂水冲洗 15 分钟

5.4 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排入下水道

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。