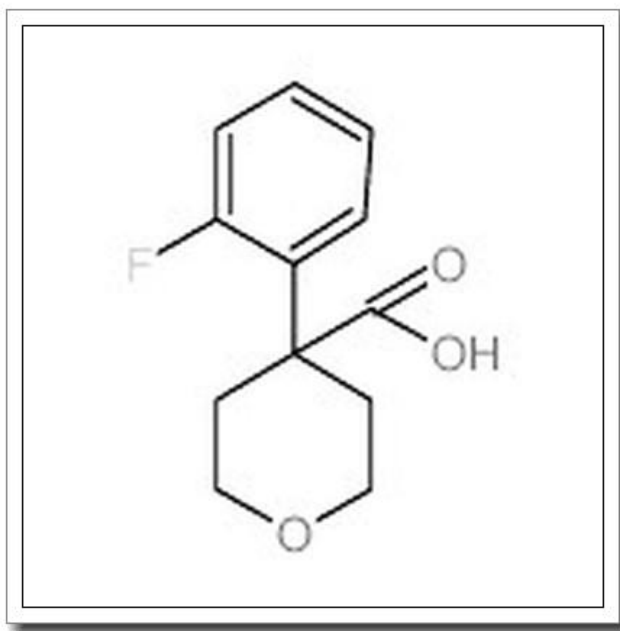


4-(2-fluorophenyl)oxane-4-carboxylic acid

4-(2-fluorophenyl)oxane-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(2-fluorophenyl)oxane-4-carboxylic acid
中文名称	4-(2-氟苯基)氧六元环-4-羧酸
CAS 号	889939-77-9
分子式	C ₁₂ H ₁₃ F ₃ O ₃
分子量	224. 228
纯度	>96%

产品说明

4-(2-fluorophenyl)oxane-4-carboxylic acid 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性粉末，化学名称为 4-(2-氟苯基)四氢吡喃-4-羧酸，CAS 号 889939-77-9，分子式 C₁₂H₁₃F₀₃，分子量 224.228。其结构包含氟代苯环与四氢吡喃环的羧酸衍生物，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物在常温下稳定，可溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环羧酸类化合物，其独特的氟原子取代赋予分子更高的脂溶性和代谢稳定性，在药物化学中常用于调节靶标分子的电子效应和空间位阻。四氢吡喃环结构可增强分子刚性，而羧酸基团则为关键的功能化位点，适用于进一步衍生化或作为氢键供体/受体参与生物活性相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药中间体合成，特别在抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物研发中作为核心骨架。具体用途包括：1) 用于蛋白激酶抑制剂的结构修饰；2) 作为 GPCR 靶向药物的前体；3) 在 PET 显影剂开发中作为氟标记模板。实验室研究中可用于构效关系分析或先导化合物优化。

4. 储存条件与使用建议

建议密闭保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照及湿度波动。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用前需恢复至室温并短暂离心。推荐工作浓度通过预实验确定，溶解时优先选用 DMSO 配制母液（建议 ≤50mM），后续用缓冲液稀释至目标浓度。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、NMR 及质谱结构确证数据。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

化学废弃物处置需符合当地法规。本产品仅限研究用途，不可用于人体或临床诊断。

注：技术参数可能因批次微调，具体以随货 COA 为准。