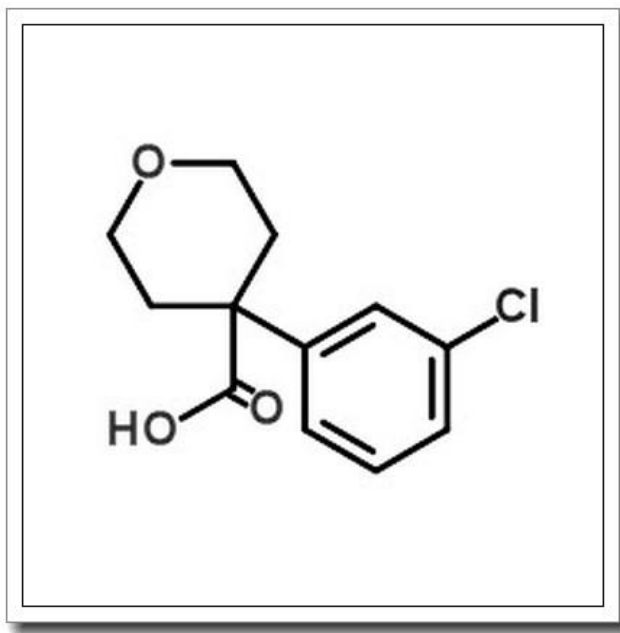


4-(3-氯苯基)四氢-2H-吡喃-4-羧酸

4-(3-chlorophenyl)oxane-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(3-chlorophenyl)oxane-4-carboxylic acid
中文名称	4-(3-氯苯基)四氢-2H-吡喃-4-羧酸
CAS 号	473706-23-9
分子式	C ₁₂ H ₁₃ ClO ₃
分子量	240.683
纯度	>96%

产品说明

4-(3-氯苯基)四氢-2H-吡喃-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(3-chlorophenyl)oxane-4-carboxylic acid, CAS 号为 473706-23-9, 分子式为 $C_{12}H_{13}ClO_3$, 分子量为 240.683。该化合物是一种含氯芳香杂环羧酸衍生物, 常温下为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中包含四氢吡喃环与 3-氯苯基的刚性组合, 羧基团赋予其酸性特征 (pK_a 约 4.2), 使其在有机溶剂如甲醇、二甲基亚砷中具有良好溶解性, 水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯基取代的四氢吡喃羧酸类化合物, 该分子可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应, 同时氯原子的存在增强了其作为中间体的反应活性。在药物化学领域, 此类结构常作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的合成砌块, 其刚性环系有助于优化配体-靶标结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。具体包括: 作为抗炎药物和中枢神经系统药物开发的关键中间体; 用于构建含四氢吡喃骨架的化合物库; 在材料科学中可作为功能化单体制备高分子材料。实验显示, 其衍生物在体外模型中表现出对 COX-2 的选择性抑制作用。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照和湿度影响。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 推荐以二甲基亚砷配制母液 (浓度 $\leq 50mM$), 避免与强氧化剂接触。溶液状态需现配现用, 长期储存可能导致水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ (面积归一化法), 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明: 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类 Category 2), 操作时应

佩戴护目镜和丁腈手套。如发生接触，需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注：本说明基于现有实验数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。