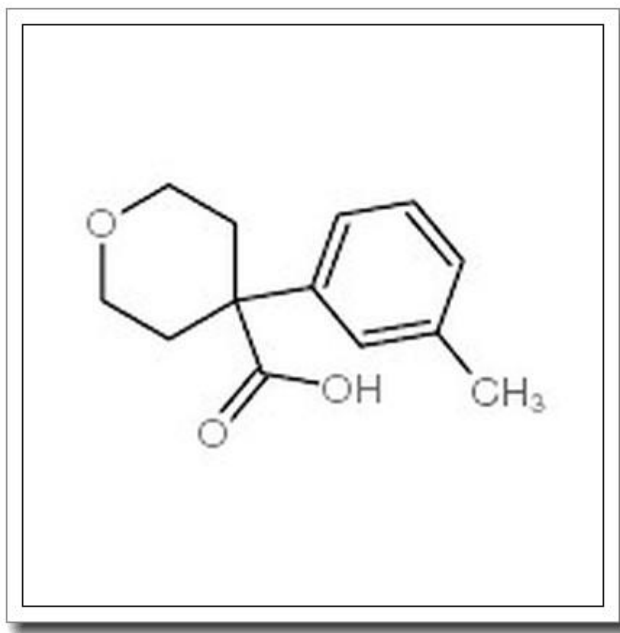


四氢-4-(3-甲基)-2H-吡喃-4-羧酸

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(3-methylphenyl)oxane-4-carboxylic acid
中文名称	四氢-4-(3-甲基)-2H-吡喃-4-羧酸
CAS 号	889940-10-7
分子式	C ₁₃ H ₁₆ O ₃
分子量	220.264
纯度	>96%

产品说明

4-(3-甲基苯基)氧杂环己烷-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-methylphenyl)oxane-4-carboxylic acid, 中文名为四氢-4-(3-甲苯基)-2H-吡喃-4-羧酸, CAS 号为 889940-10-7。其分子式为 C₁₃H₁₆O₃, 分子量为 220.264, 纯度经高效液相色谱 (HPLC) 测定大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 常温下稳定, 微溶于水, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砷 (DMSO)。其结构中的氧杂环己烷骨架和羧酸基团赋予其独特的化学性质, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子修饰的原料。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其苯环和氧杂环的协同作用, 在药物化学中具有重要价值。羧酸基团可进一步衍生为酯、酰胺等官能团, 扩展其应用范围。其结构特征可能影响细胞膜通透性和靶标结合能力, 因此在先导化合物优化中常用于改善药代动力学性质。此外, 该分子可作为手性合成子, 用于不对称催化反应或手性药物开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和精细化工领域。在药物发现中, 常用于构建中枢神经系统药物或抗炎化合物的核心骨架。具体用途包括: 作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的合成前体; 用于结构-活性关系 (SAR) 研究中的分子修饰; 在材料科学中可作为液晶材料的中间体。实验显示其在体外模型中具有潜在的生物活性, 但具体药理作用需进一步验证。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可置于 4° C 环境。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 防止吸湿和氧化。使用前需恢复至室温并充分摇匀。溶解时建议先用少量 DMSO 助溶, 再用缓冲液稀释至工作浓度。避免与强氧化剂或强酸强碱接触, 实验操作应在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（NMR）、质谱（MS）和 HPLC 三重验证，确保结构准确性和纯度达标。安全数据表明，该物质可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废物处理，遵守当地环保法规。详细安全信息请参阅随货提供的材料安全数据表（MSDS）。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。使用者应具备专业化学知识并在适当防护条件下操作。