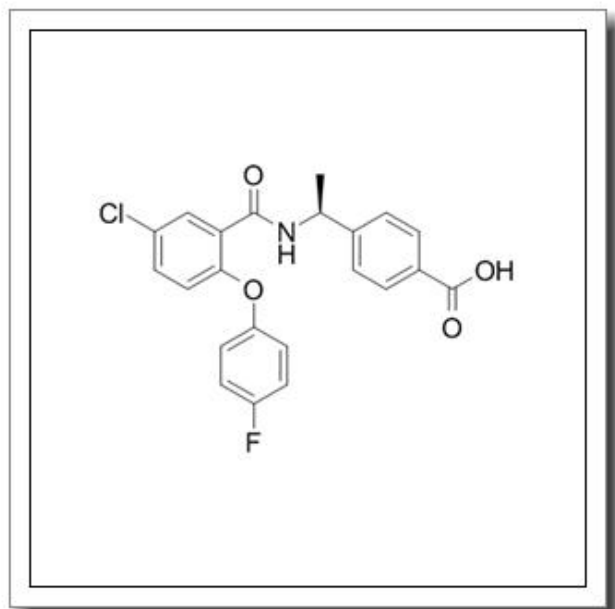


4-[(1S)-1-[[5-氯-2-(4-氟苯氧基)苄基]氨基]乙基]苯甲酸

4-[(1S)-1-[[5-chloro-2-(4-fluorophenoxy)benzoyl]amino]ethyl]benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[(1S)-1-[[5-chloro-2-(4-fluorophenoxy)benzoyl]amino]ethyl]benzoic acid
中文名称	4-[(1S)-1-[[5-氯-2-(4-氟苯氧基)苄基]氨基]乙基]苯甲酸
CAS 号	847728-01-2
分子式	C ₂₂ H ₁₇ ClFNO ₄
分子量	413.826
纯度	≥96%

产品说明

4-[(1S)-1-[[5-氯-2-(4-氟苯氧基)苄基]氨基]乙基]苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 4-[(1S)-1-[[5-chloro-2-(4-fluorophenoxy)benzoyl]amino]ethyl]benzoic acid, CAS 号 847728-01-2, 分子式 C₂₂H₁₇ClFN₂O₄, 分子量 413.826。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 验证 ≥96%，具有明确的手性中心 (1S 构型)。该化合物在常温下稳定，微溶于水，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟苯氧基的芳香族衍生物，该分子通过特异性结合靶蛋白（如核受体或激酶）发挥调控作用。其结构中的氯原子和氟原子增强了电子亲和性，而羧酸基团提供了关键的分子识别位点，使其在信号通路抑制或酶活性调节中表现出高选择性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于药物研发领域，尤其作为小分子抑制剂或中间体用于以下方向：抗炎药物先导化合物优化、代谢性疾病靶点研究（如 PPAR γ 拮抗剂开发）、以及肿瘤治疗相关通路筛选实验。实验室级应用包括体外酶活性检测、细胞模型构建及结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中，避免光照与反复冻融。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下称量，推荐以 DMSO 配制母液（浓度 ≤10mM），分装后 -80°C 长期保存。工作液需现配现用，避免反复解冻。

5. 质量控制与安全信息

每批次产品均提供 COA（质量分析证书），包含 HPLC 纯度、水分含量及重金属残留数据。操作时需佩戴防护手套及护目镜，皮肤接触后立即用大量清水冲洗。该化合物尚未完成全面毒理学评估，禁止直接排放至环境。废弃物处理需符合危险化学品管理条例。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。)