

# 2-(4-氰基-3-氟苯基)-2-甲基丙酸

*Benzeneacetic acid, 4-cyano-3-fluoro- $\alpha$ ,  $\alpha$ -dimethyl-*

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzeneacetic acid, 4-cyano-3-fluoro- $\alpha$ , $\alpha$ -dimethyl-
中文名称	2-(4-氰基-3-氟苯基)-2-甲基丙酸
CAS 号	1314745-86-2
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-(4-氰基-3-氟苯基)-2-甲基丙酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Benzeneacetic acid, 4-cyano-3-fluoro- $\alpha$ ,  $\alpha$ -dimethyl-, CAS 号为 1314745-86-2, 分子式为  $C_{11}H_{10}FN_2$ , 纯度 >96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有芳环结构特征, 含氰基和氟取代基, 分子量为 207.20。其疏水性和电子效应使其在有机合成中表现出独特的反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物, 该分子中的氰基和氟原子可显著增强其与生物靶标的结合能力, 常用于药物活性分子的结构修饰。氟原子的引入能改善代谢稳定性, 而氰基可作为氢键受体或参与点击化学反应, 在蛋白酶抑制剂和激酶调节剂的开发中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药中间体合成, 特别适用于抗肿瘤药物和中枢神经系统药物的研发。在材料科学领域, 可用作液晶材料的改性单体。实验室中常用于研究芳环亲核取代反应的模型化合物, 或作为荧光标记物的前体。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下密封保存, 有效期 24 个月。使用时需在惰性气体保护下操作, 避免接触强氧化剂。溶解性测试表明, 其在 DMSO 中溶解度 >50mg/mL, 建议先用有机溶剂助溶后再加入水相体系。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 进行批次质量控制, 确保杂质含量 <4%。该化合物属于刺激性化学品, 操作时应佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入粉尘。如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置, MSDS 可应要求提供。

注: 本产品仅限科研用途, 不可用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献确认实验方案。