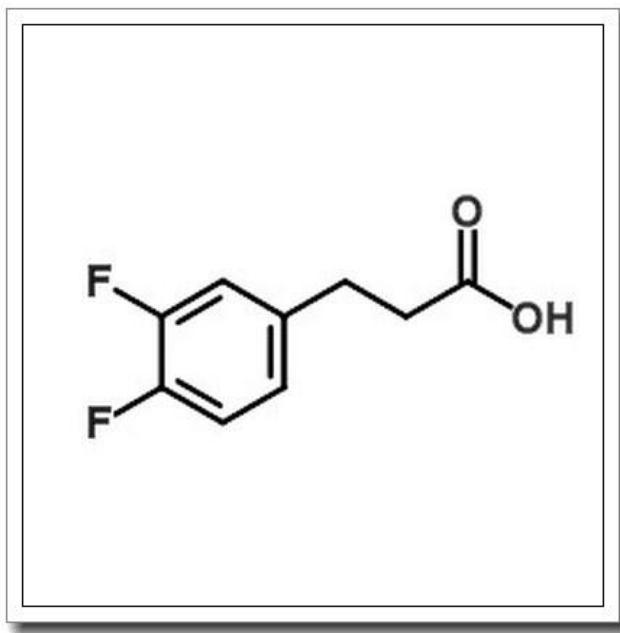


3-(3,4-二氟苯基)丙酸

3,4-difluorohydrocinnamic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,4-difluorohydrocinnamic acid
中文名称	3-(3,4-二氟苯基)丙酸
CAS 号	161712-75-0
分子式	C ₉ H ₈ F ₂ O ₂
分子量	186.155
纯度	>96%

产品说明

3,4-二氟苯丙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3,4-二氟苯丙酸 (3,4-difluorohydrocinnamic acid) 是一种含氟芳香族羧酸衍生物，化学式为 $C_9H_8F_2O_2$ ，分子量 186.155，CAS 登记号 161712-75-0。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。其结构中的二氟苯基和羧酸基团赋予其独特的电子效应和反应活性，是医药及材料化学中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯丙酸类化合物的氟化衍生物，该分子可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应，同时氟原子的引入增强了其脂溶性和代谢稳定性。在药物设计中，3,4-二氟苯丙酸常用于构建靶向酶或受体的活性分子，尤其在抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域：

- 医药中间体：用于合成含氟非甾体抗炎药 (NSAIDs) 或激酶抑制剂。
- 材料科学：作为液晶材料或高分子单体的修饰基团。
- 科研试剂：在氟化学研究中作为标准品或反应底物。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8°C 长期保存。使用前需恢复至室温并充分干燥。操作时需佩戴防护手套、护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解建议采用惰性溶剂（如氮气保护的 DMSO），以降低氧化风险。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 >96%，批次间一致性严格控制。安全数据表明，其急性毒性较低 (LD50 未明确)，但仍需避免直接暴露。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

注：本说明基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。