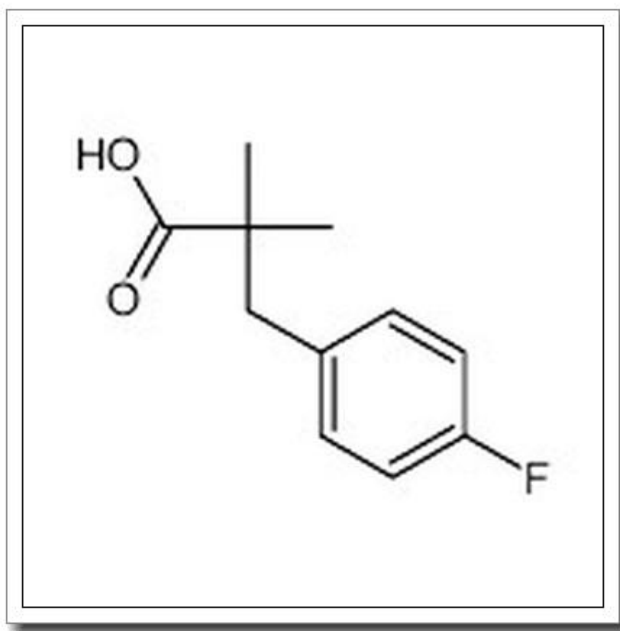


3-(4-Fluorophenyl)-2,2-dimethylpropanoic acid

3-(4-Fluorophenyl)-2,2-dimethylpropanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(4-Fluorophenyl)-2,2-dimethylpropanoic acid
中文名称	3-(4-Fluorophenyl)-2,2-dimethylpropanoic acid
CAS 号	676621-96-8
分子式	C ₁₁ H ₁₃ F ₀₂
分子量	196.218
纯度	>96%

产品说明

3-(4-Fluorophenyl)-2,2-dimethylpropanoic acid 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 3-(4-氟苯基)-2,2-二甲基丙酸，CAS 号为 676621-96-8，分子式 C₁₁H₁₃F₀₂，分子量 196.218。其结构中含氟苯基团与二甲基丙酸骨架，赋予其独特的极性和空间位阻效应。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 128-132℃，易溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水（25℃时溶解度 < 0.1 mg/mL）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为芳香族氟代羧酸衍生物，可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应，同时氟原子的强电负性使其成为药物设计中改善代谢稳定性和膜穿透性的关键修饰基团。在酶抑制研究中，其刚性结构可特异性结合某些蛋白活性位点，常用于先导化合物优化。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成，特别是抗炎、抗肿瘤药物的结构修饰。具体用途包括：1) 作为非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的氟代前体；2) 用于构建激酶抑制剂的核心片段；3) 在放射性标记探针开发中作为示踪分子载体。实验室级产品适用于高通量筛选及结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密闭保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照及湿度 > 60%。开封后需充氮保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套与护目镜。配制溶液建议现配现用，若需保存，推荐 -80℃ 分装存储 (≤ 3 个月)。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、水分 (KF 法) 及重金属 (ICP-MS) 数据。安全数据：LD₅₀ (大鼠口服) > 2000 mg/kg，但可能引起眼睛和皮肤刺激。意外接触时需用大量清水冲洗 15 分钟，并及时就医。废弃物处理应遵循当地危险化学品法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 具体应用需结合实验验证。产品规格可能因批次调整, 请以随货 COA 为准。)