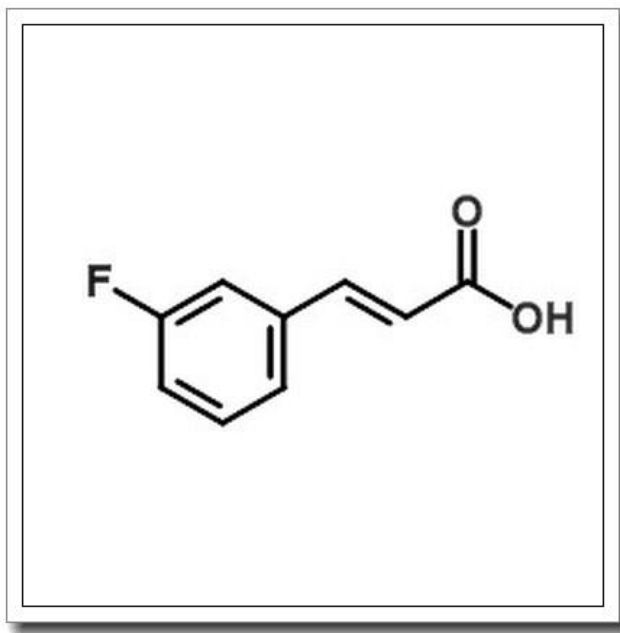


3-氟肉桂酸

3-Fluorocinnamic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Fluorocinnamic acid
中文名称	3-氟肉桂酸
CAS 号	20595-30-6
分子式	C ₉ H ₇ F ₀ O ₂
分子量	166.149
纯度	>96%

产品说明

3-氟肉桂酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氟肉桂酸 (3-Fluorocinnamic acid) 是一种有机氟化合物，化学式为 $C_9H_7FO_2$ ，分子量为 166.149，CAS 号为 20595-30-6。本品为白色至类白色结晶粉末，纯度高于 96%。其结构特点是苯环 3 位上的氢被氟原子取代，形成具有独特电子效应的肉桂酸衍生物。该化合物在紫外光区有特征吸收，可溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水，熔点为 180-183°C。

2. 生物化学功能与重要性

作为肉桂酸的氟代衍生物，3-氟肉桂酸因其氟原子的强电负性和小原子半径，能够显著改变母体分子的电子分布和空间位阻，从而影响其与生物靶标的相互作用。在药物化学中，氟原子的引入常可增强化合物的代谢稳定性、细胞膜穿透性及与受体的结合能力。此外，该分子可作为合成中间体，用于构建含氟杂环或复杂药物分子骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氟肉桂酸广泛应用于医药研发、材料科学和有机合成领域。在医药领域，它是合成抗炎、抗肿瘤药物的重要前体，例如用于制备氟代非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的中间体。在材料科学中，可用于合成含氟液晶或光电材料。此外，在学术研究中常作为探针分子，用于研究酶催化机制或氟原子对生物活性的影响。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中，推荐储存温度为 2-8°C。长期存放建议充入惰性气体保护。使用时需佩戴防护手套、护目镜及实验服，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议采用温和加热 ($\leq 50^\circ\text{C}$) 与超声辅助，溶剂选择需根据反应体系极性匹配。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表明，其急性

毒性 (LD50) 为大鼠经口 >2000 mg/kg, 但可能对眼睛和呼吸道产生刺激性。操作应在通风橱中进行, 意外接触时立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵守当地法规, 不可直接排入下水道。

(注: 实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并严格遵循实验室安全规程。)