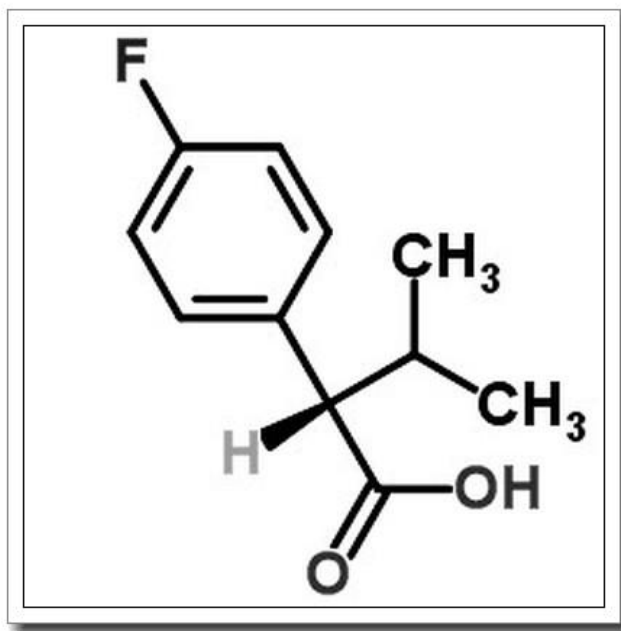


(S)-2-(4-Fluorophenyl)-3-methylbutanoic acid

(S)-2-(4-Fluorophenyl)-3-methylbutanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-2-(4-Fluorophenyl)-3-methylbutanoic acid
中文名称	(S)-2-(4-Fluorophenyl)-3-methylbutanoic acid
CAS 号	55332-37-1
分子式	C ₁₁ H ₁₃ F ₀ O ₂
分子量	196.218
纯度	>96%

产品说明

(S)-2-(4-氟苯基)-3-甲基丁酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(S)-2-(4-氟苯基)-3-甲基丁酸 (CAS 号: 55332-37-1) 是一种手性有机化合物, 分子式为 $C_{11}H_{13}FO_2$, 分子量为 196.218。该化合物以单一对映体形式存在 (S 构型), 纯度超过 96%, 常温下为白色至类白色结晶或粉末。其结构中含有一个氟代苯环和一个羧酸基团, 具有显著的疏水性和立体选择性, 适合作为手性合成砌块或生物活性分子中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其手性中心和氟原子的引入, 在药物化学中表现出独特的生物活性。氟原子的强电负性可增强分子与靶标蛋白的相互作用, 而羧酸基团则提供了进一步衍生化的位点。其 (S)-构型在酶促反应或受体结合中可能表现出与 (R)-构型不同的活性, 因此在不对称合成和手性药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

(S)-2-(4-氟苯基)-3-甲基丁酸主要用于以下领域:

- 医药中间体: 作为非甾体抗炎药、抗抑郁药或抗菌药物的手性合成前体。
- 不对称催化: 作为配体或底物参与过渡金属催化的对映选择性反应。
- 生化研究: 用于研究氟代芳香族化合物在代谢途径中的行为。

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, 避免与强氧化剂接触。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 以防止吸湿或氧化。溶解性测试表明, 该化合物易溶于甲醇、乙醇等极性有机溶剂, 微溶于水。实验过程中建议佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 并经由质谱和核磁共振谱确认结构。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD50 数据待补充), 但仍可能对眼睛和皮肤产生刺激性。

如意外接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵循当地化学品管理法规。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件进一步优化。