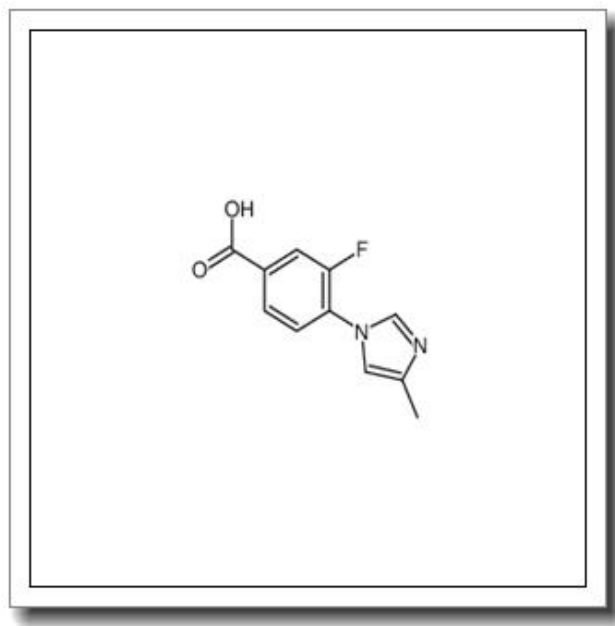


3-氟-4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯甲酸

3-Fluoro-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Fluoro-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)benzoic acid
中文名称	3-氟-4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯甲酸
CAS 号	1243205-04-0
分子式	C ₁₁ H ₉ FN ₂ O ₂
分子量	220.2
纯度	≥96%

产品说明

3-氟-4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-fluoro-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)benzoic acid，分子式 C₁₁H₉FN₂O₂，分子量 220.2，CAS 号 1243205-04-0。其结构中含氟原子与咪唑环，赋予其独特的电子效应和生物活性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物，该化合物可通过氢键和疏水相互作用与生物靶点结合。咪唑基团使其具备潜在金属离子螯合能力，而羧酸基团增强了分子极性，适用于药物偶联或修饰。氟原子的引入可调节脂溶性和代谢稳定性，在药物设计中常用于先导化合物优化。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域，尤其作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的中间体。在抗肿瘤、抗炎药物开发中，可用于结构活性关系 (SAR) 研究。亦可作为荧光标记探针的合成前体，或用于蛋白质-小分子相互作用实验。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20℃、避光、干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议充氮密封保存。使用前需平衡至室温，避免反复冻融。溶解时优先选用 DMSO 配制母液 (建议浓度 10-50 mM)，后续用缓冲液稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、NMR 和质谱验证结构，批次间纯度偏差 ≤1%。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地法规。

(注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。)