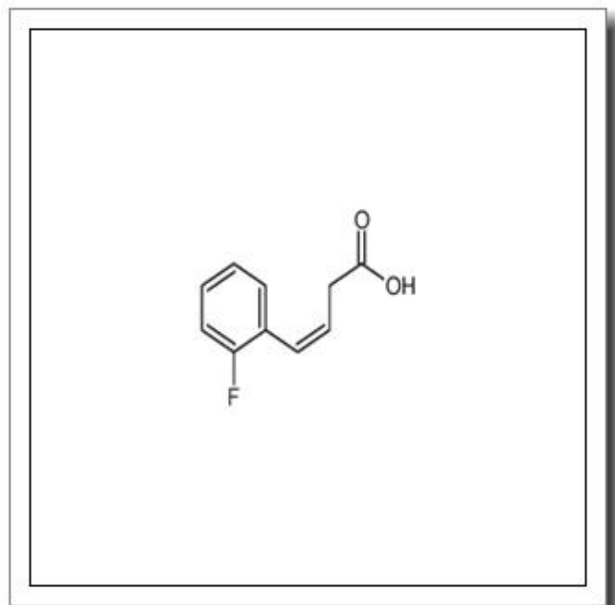


(3E)-4-(2-Fluorophenyl)-3-butenic acid

(3E)-4-(2-Fluorophenyl)-3-butenic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3E)-4-(2-Fluorophenyl)-3-butenic acid
中文名称	(3E)-4-(2-Fluorophenyl)-3-butenic acid
CAS 号	127406-53-5
分子式	C ₁₀ H ₉ F ₀ O ₂
分子量	180.176
纯度	≥ 96%

产品说明

(3E)-4-(2-氟苯基)-3-丁烯酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(3E)-4-(2-氟苯基)-3-丁烯酸 (CAS 号: 127406-53-5) 是一种含氟不饱和羧酸衍生物, 分子式为 $C_{10}H_9FO_2$, 分子量 180.176。其结构特征为苯环邻位氟取代与 α, β -不饱和羧酸共轭体系, 赋予该化合物独特的电子效应和反应活性。常温下呈白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$ (HPLC), 易溶于极性有机溶剂如甲醇、乙腈, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其氟原子引入和共轭双键结构, 在生物体系中表现出显著的药理活性。氟原子的强电负性可增强分子与靶标蛋白的相互作用, 而 α, β -不饱和羧酸结构使其可作为迈克尔反应受体, 参与共价键形成。这些特性使其在药物研发中成为关键中间体, 尤其在抗炎、抗肿瘤靶点分子的设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为高端医药中间体, 本产品主要用于以下领域:

- 非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的结构修饰, 用于开发选择性 COX-2 抑制剂
- 激酶抑制剂类抗癌药物的合成前体, 如 EGFR 或 VEGFR 抑制剂
- 氟代芳香族化合物库构建, 用于高通量药物筛选
- 有机合成中作为手性砌块, 用于不对称催化反应研究

4. 储存条件与使用建议

推荐在 $-20^{\circ}C$ 避光密封保存, 充惰性气体保护可延长稳定性。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行, 佩戴防化手套及护目镜。溶解时优先选用氩气保护的干燥 DMSO 或 THF, 现配现用以防止氧化降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证, 符合药物研发级标准。MSDS 显示其属于刺

激性化学品（GHS 分类：皮肤刺激 2 类），避免直接接触。如意外吸入或接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地危险化学品管理法规。

（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。更多技术参数可索取 COA 报告。）