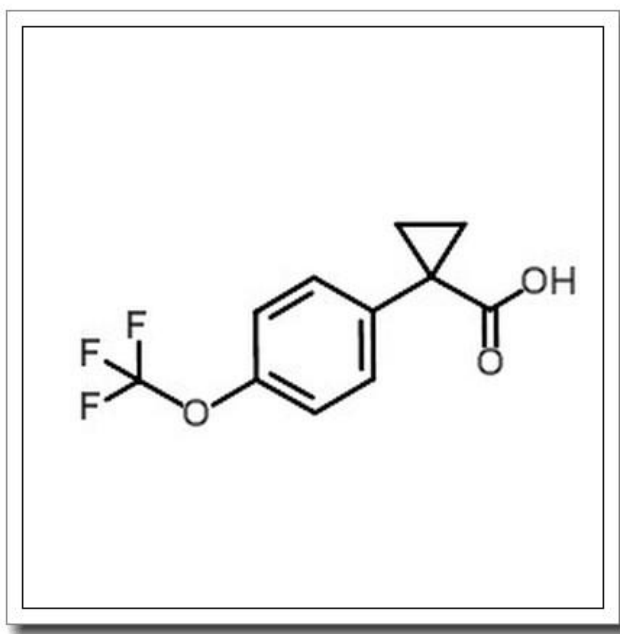


1-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]cyclopropane-1-carboxylic acid

1-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]cyclopropane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]cyclopropane-1-carboxylic acid
中文名称	1-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]cyclopropane-1-carboxylic acid
CAS 号	936727-93-4
分子式	C11H9F3O3
分子量	246.183
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-[4-(三氟甲氧基)苯基]环丙烷-1-羧酸 (CAS 号: 936727-93-4) 是一种含氟有机化合物, 分子式为 $C_{11}H_9F_3O_3$, 分子量为 246.183。该化合物由环丙烷羧酸骨架与对位三氟甲氧基苯基取代基构成, 具有显著的疏水性和电子效应。其纯度高于 96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂 (如甲醇、乙醇、DMSO), 微溶于水。三氟甲氧基的引入增强了化合物的代谢稳定性和生物膜穿透能力, 使其在药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为环丙烷羧酸衍生物, 可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应, 是合成复杂分子的关键中间体。其环丙烷结构可调节分子构象刚性, 而三氟甲氧基的强吸电子特性可能影响靶标蛋白的相互作用。在药物研发中, 此类结构常用于优化先导化合物的药代动力学性质, 例如提高血脑屏障穿透性或抵抗酶降解。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于构建小分子抑制剂或受体调节剂, 尤其在中枢神经系统疾病 (如抑郁症、癫痫) 和炎症领域的研究中具有潜力。
- 农药化学: 作为含氟农药中间体, 参与合成具有高效杀虫或除草活性的化合物。
- 材料科学: 可用于制备含氟高分子单体, 改善材料的耐候性和化学稳定性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用前恢复至室温并干燥处理, 避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试推荐先以少量 DMSO 助溶, 再稀释至目标溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间质量稳定。安全数据:

- 危害声明: 可能引起皮肤刺激 (H315) 和眼睛刺激 (H319)。
- 防范措施: 避免吸入粉尘 (P261), 接触后立即用大量清水冲洗

(P305+P351+P338)。

- 废弃处置：按危险化学品规范处理，不可直接排放至环境中。

(全文共计 436 字)