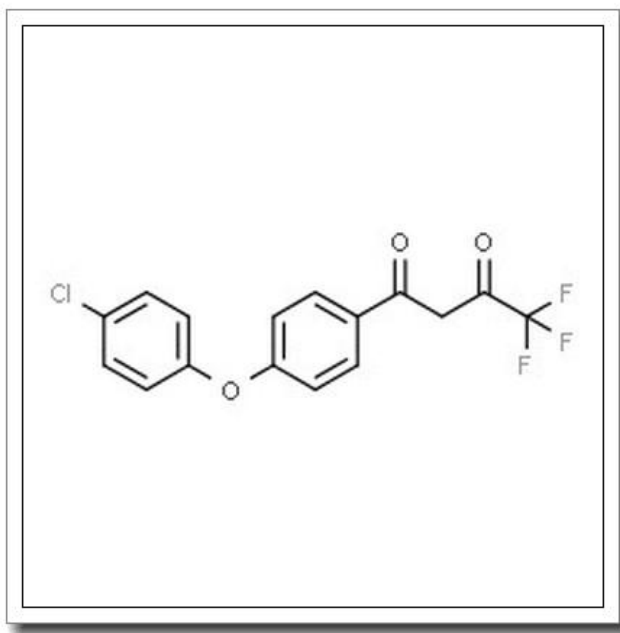


1-[4-(4-Chlorophenoxy)phenyl]-4,4,4-trifluoro-1,3-butanedione

1-[4-(4-Chlorophenoxy)phenyl]-4,4,4-trifluoro-1,3-butanedione



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[4-(4-Chlorophenoxy)phenyl]-4,4,4-trifluoro-1,3-butanedione
中文名称	1-[4-(4-Chlorophenoxy)phenyl]-4,4,4-trifluoro-1,3-butanedione
CAS 号	1806473-78-8
分子式	C ₁₆ H ₁₀ ClF ₃ O ₃
分子量	342.697
纯度	>96%

产品说明

1-[4-(4-氯苯氧基)苯基]-4,4,4-三氟-1,3-丁二酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-[4-(4-Chlorophenoxy)phenyl]-4,4,4-trifluoro-1,3-butanedione，是一种含氯苯氧基和三氟甲基的 β -二酮类化合物。其分子式为 $C_{16}H_{10}ClF_3O_3$ ，分子量 342.697，CAS 号为 1806473-78-8。该化合物常温下为白色至淡黄色结晶粉末，纯度 >96%，具有典型的 β -二酮结构特征，可通过酮-烯醇互变异构形成稳定的共轭体系。

2. 生物化学功能与重要性

作为三氟甲基化 β -二酮衍生物，该化合物在金属配位化学中表现出优异的螯合能力，尤其与过渡金属离子（如 Cu^{2+} 、 Fe^{3+} ）可形成稳定络合物。其结构中氯苯氧基的存在增强了疏水性，而三氟甲基则显著提高代谢稳定性，使其在药物化学中成为重要的中间体，可用于构建抗炎、抗菌药物的核心骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于合成靶向激酶抑制剂及抗菌先导化合物
- 3.2 材料科学：作为有机电致发光材料（OLED）的前驱体
- 3.3 分析化学：开发金属离子荧光探针的配体单元
- 3.4 农药开发：作用于植物激素受体的潜在增效剂

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中，避免光照及湿度 >60%
- 4.2 溶解性：推荐使用 DMSO（50mg/mL）或丙酮配制母液
- 4.3 操作：应在通风橱中使用，避免直接接触皮肤
- 4.4 稳定性：溶液状态下建议现配现用， $-80^{\circ}C$ 可保存 1 个月

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 <0.5%
- 5.2 安全标识：GHS07（刺激性），佩戴护目镜及丁腈手套操作

5.3 废弃物处理: 按有机卤化物废液规范处置

5.4 应急处理: 皮肤接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献资料并开展预实验验证。