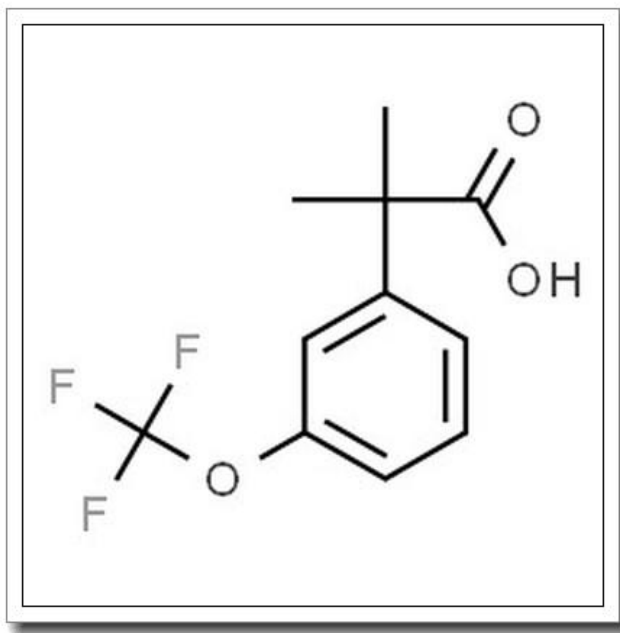


# 2-甲基-2-(3-(三氟甲氧基)苯基)丙酸

*2-methyl-2-(3-(trifluoromethoxy)phenyl)propanoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-methyl-2-(3-(trifluoromethoxy)phenyl)propanoic acid
中文名称	2-甲基-2-(3-(三氟甲氧基)苯基)丙酸
CAS 号	1260875-58-8
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> F <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	248.198
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-甲基-2-(3-(三氟甲氧基)苯基)丙酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 2-methyl-2-(3-(trifluoromethoxy)phenyl)propanoic acid，中文名 2-甲基-2-(3-(三氟甲氧基)苯基)丙酸，CAS 号 1260875-58-8，分子式 C<sub>11</sub>H<sub>11</sub>F<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量 248.198。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度>96%，具有苯环结构及三氟甲氧基特征官能团，疏水性较强，可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。其化学稳定性良好，但需避免强酸、强碱及高温环境。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族羧酸衍生物，该分子因其三氟甲氧基的强电负性和空间位阻效应，在药物化学中常用于调节化合物的脂溶性、代谢稳定性及靶标结合能力。其羧酸基团可进一步衍生为酯、酰胺等活性结构，是设计酶抑制剂或受体调节剂的重要中间体。在生物体内可能参与调控炎症或氧化应激相关通路。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域，尤其作为非甾体抗炎药（NSAIDs）或抗肿瘤化合物的关键中间体。具体用途包括：

- 用于构建小分子药物库，筛选具有抗炎或镇痛活性的先导化合物
- 作为放射性标记前体，用于代谢途径研究
- 在材料科学中，可作为含氟高分子单体的改性原料

#### 4. 储存条件与使用建议

储存条件：需密封保存于-20℃至 4℃干燥环境中，避免光照及湿气。长期储存建议充入惰性气体（如氮气）。

使用建议：

- 溶解时优先选用无水 DMSO 或乙醇，配制溶液需现配现用
- 操作时佩戴防尘口罩、护目镜及丁腈手套，避免直接接触皮肤或吸入粉尘
- 实验废料应按危险化学品规范处置

## 5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：

- 危险类别：刺激性物质（皮肤接触可能导致红肿）
- 应急处理：皮肤接触后立即用大量清水冲洗 15 分钟，眼睛接触需用生理盐水冲洗并就医
- 运输编码：UN 3077（环境有害固体）
- 符合 REACH 法规注册要求，提供完整 COA 及 MSDS 文件

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床、食品或家庭用途。使用前请查阅最新版安全数据表（SDS）。