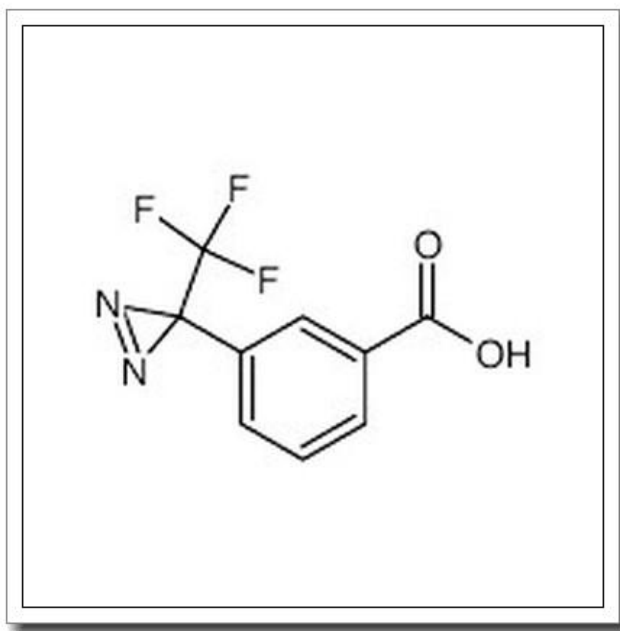


3-[3-(trifluoromethyl)-3H-diazirin-3-yl]benzoic acid

3-[3-(trifluoromethyl)-3H-diazirin-3-yl]benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[3-(trifluoromethyl)-3H-diazirin-3-yl]benzoic acid
中文名称	3-[3-(trifluoromethyl)-3H-diazirin-3-yl]benzoic acid
CAS 号	176389-60-9
分子式	C9H5F3N2O2
分子量	230.143
纯度	>96%

产品说明

3-[3-(三氟甲基)-3H-二氮丙啶-3-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-[3-(三氟甲基)-3H-二氮丙啶-3-基]苯甲酸，CAS 号 176389-60-9，分子式 C₉H₅F₃N₂O₂，分子量 230.143。其结构中包含高反应活性的二氮丙啶环和三氟甲基基团，赋予其独特的光敏性与交联特性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 185-188° C（分解），易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为光活化交联剂，该化合物在紫外光（300-365 nm）激发下可生成高活性卡宾中间体，与邻近分子形成共价键。三氟甲基的强吸电子效应显著提升二氮丙啶环的开环效率，使其成为研究蛋白质-蛋白质相互作用、核酸-蛋白复合物空间构象的理想工具。其苯甲酸基团便于后续羧基活化修饰，广泛应用于生物共轭化学。

3. 主要应用领域与具体用途

在化学生物学领域，本品主要用于：

- （1）膜蛋白相互作用研究，通过光交联捕获瞬时结合态；
- （2）药物靶点鉴定，标记小分子探针以识别结合位点；
- （3）材料科学中聚合物网络构建，作为光响应交联剂；
- （4）开发 PET 显影剂前体，利用 18F 标记类似物进行活体成像。

4. 储存条件与使用建议

需避光保存于-20° C 干燥环境中，开封后充惰性气体保护。工作溶液建议现配现用，溶剂首选无水 DMSO（浓度 ≤10 mM），避免反复冻融。光照实验需在氮气保护下进行，使用 365 nm LED 光源时推荐功率 5-10 mW/cm²，照射时间控制在 30-120 秒。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、NMR 氢谱验证及质谱分子量确认。本品对湿度敏

感，操作需在干燥环境下进行。MSDS 显示其具潜在皮肤刺激性，接触时需佩戴防
化手套及护目镜。废弃物处理应遵循有机卤化物处置规范，禁止直接排入水体。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验体系优化条件。）