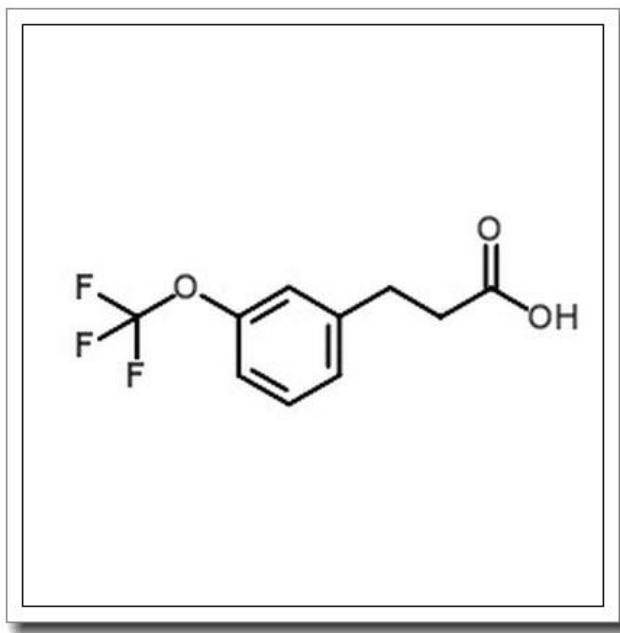


3-[3-(三氟甲氧基)苯基]丙酸

3-[3-(trifluoromethoxy)phenyl]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[3-(trifluoromethoxy)phenyl]propanoic acid
中文名称	3-[3-(三氟甲氧基)苯基]丙酸
CAS 号	168833-77-0
分子式	C ₁₀ H ₉ F ₃ O ₃
分子量	234.172
纯度	>96%

产品说明

3-[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

3-[3-(三氟甲氧基)苯基]丙酸 (CAS 号: 168833-77-0) 是一种含氟芳香族羧酸衍生物, 分子式为 $C_{10}H_9F_3O_3$, 分子量为 234.172。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度标准 >96%, 具有显著的疏水性和稳定性。其结构中的三氟甲氧基 (-OCF₃) 与丙酸侧链赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可作为关键中间体用于合成具有生物活性的分子, 尤其是非甾体抗炎药 (NSAIDs) 和抗抑郁药物的修饰前体。三氟甲氧基的引入能增强化合物的代谢稳定性和细胞膜穿透性, 而羧酸基团则提供了进一步衍生化的反应位点, 例如酯化或酰胺化。此外, 其苯丙酸骨架与某些内源性信号分子结构类似, 可能参与调控炎症或神经递质相关通路。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本产品常用于构建靶向 COX-2 抑制剂的先导化合物, 或用于开发中枢神经系统药物。在材料科学中, 其含氟特性可用于制备特殊涂层或液晶材料。实验室用途包括作为有机合成砌块、同位素标记底物或分析标准品。具体实验方案需参考相关文献, 建议在惰性气体保护下进行反应以避免副反应。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20° C 至 4° C 的密闭容器中, 避光防潮, 长期保存建议充入惰性气体。开封后需在干燥环境中尽快使用, 避免反复冻融。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂, 水溶性较低 (<0.1 mg/mL), 配制溶液时需超声辅助。实验操作建议佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 >96%, 批次间差异 <2%。潜在危害包括皮肤刺激 (GHS 分

类: Category 2) 和眼睛损伤 (Category 1), 接触后应立即用大量清水冲洗。安全数据表 (SDS) 包含详细毒理学数据 (LD50 大鼠经口: >2000 mg/kg)。废弃物处理需符合当地法规, 不可直接排入下水道。运输分类为非危险品, 但建议使用防震包装。

注: 以上信息基于现有研究数据, 实际应用前请进行充分验证。技术咨询请联系专业化学品供应商或研发团队。