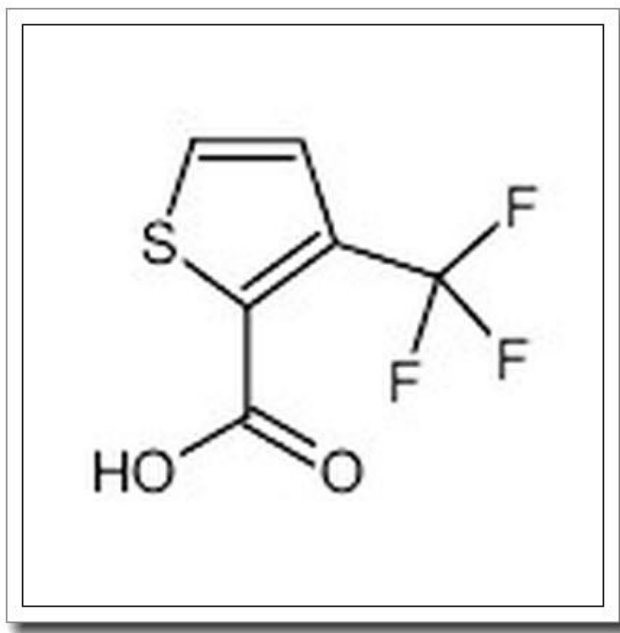


3-(三氟甲基)噻吩-2-羧酸

3-(Trifluoromethyl) thiophene-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(Trifluoromethyl) thiophene-2-carboxylic acid
中文名称	3-(三氟甲基)噻吩-2-羧酸
CAS 号	767337-59-7
分子式	C ₆ H ₃ F ₃ O ₂ S
分子量	196.147
纯度	>96%

产品说明

3-(三氟甲基)噻吩-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(三氟甲基)噻吩-2-羧酸 (CAS 号: 767337-59-7) 是一种含氟杂环羧酸化合物, 分子式为 $C_6H_3F_3O_2S$, 分子量 196.147。其结构以噻吩环为核心, 2 位羧基与 3 位三氟甲基的协同作用赋予其独特的电子效应和空间位阻。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水。三氟甲基的强吸电子特性使其成为有机合成中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族化合物, 其分子中的噻吩环和三氟甲基可显著增强生物活性分子的代谢稳定性与脂溶性。羧基官能团提供了衍生化位点, 便于与氨基或羟基缩合形成酰胺或酯类衍生物。此类结构在药物化学中常用于优化先导化合物的药代动力学性质, 尤其在抗炎、抗肿瘤靶点分子设计中具有广泛应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和材料科学领域。在医药研发中, 作为关键砌块用于合成 EGFR 抑制剂、COX-2 选择性拮抗剂等小分子药物; 在材料领域, 可用于制备含氟液晶单体或光电材料改性剂。具体实验用途包括但不限于: 金属催化偶联反应的底物、多肽模拟物的侧链修饰、高分子聚合物的功能化单体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护, 以防降解。使用前需恢复至室温平衡, 称量时建议在干燥环境下操作。溶解性测试表明, 推荐使用无水 DMSO 配制母液 (浓度 ≤ 50 mM), 后续可用缓冲液稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 归一化法检测纯度 >96%, 批次间差异 <1%。需注意其固体形态对呼吸道有轻微刺激性, 操作时应佩戴防护手套及防尘口罩。若不慎接触皮肤, 需立即用

大量清水冲洗。废弃物处理需符合有机氟化合物处置规范，禁止直接排入下水系统。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）