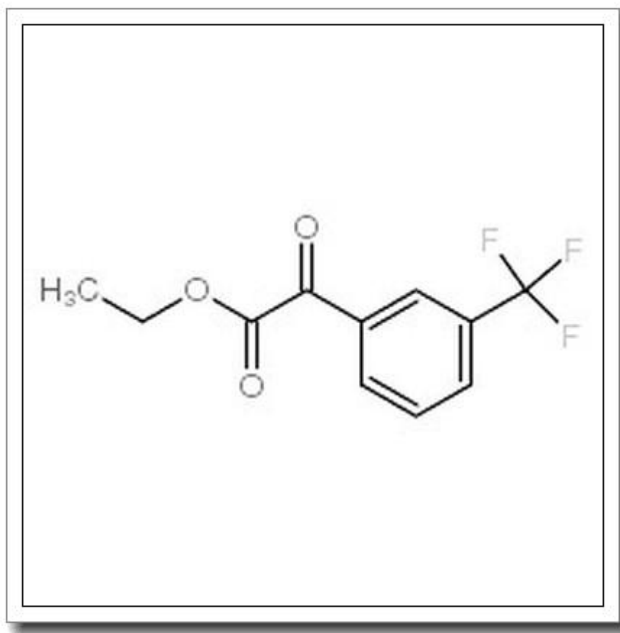


## 3-氧代-3-(3-三氟甲基)丙酸乙酯

*ethyl 2-oxo-2-[3-(trifluoromethyl)phenyl]acetate*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 2-oxo-2-[3-(trifluoromethyl)phenyl]acetate
中文名称	3-氧代-3-(3-三氟甲基)丙酸乙酯
CAS 号	110193-60-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> F <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	246.183
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-氧代-3-(3-三氟甲基)丙酸乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 ethyl 2-oxo-2-[3-(trifluoromethyl)phenyl]acetate, 中文名 3-氧代-3-(3-三氟甲基)丙酸乙酯, CAS 号 110193-60-7, 分子式 C<sub>11</sub>H<sub>9</sub>F<sub>3</sub>O<sub>3</sub>, 分子量 246.183。外观为无色至淡黄色透明液体, 具有酯类特征气味。纯度标准 >96%, 密度约 1.3 g/cm<sup>3</sup> (25°C), 沸点 280-282°C, 闪点 >110°C, 折射率 n<sub>20/D</sub> 1.45-1.47。该化合物含三氟甲基苯基活性基团, 兼具酯键与酮羰基反应位点, 易溶于有机溶剂如乙醇、乙醚和 DMF。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族 β-酮酯衍生物, 其分子中三氟甲基赋予强电负性与代谢稳定性, 酮羰基可参与亲核加成或缩合反应, 酯基则提供水解修饰位点。在药物化学中, 该结构是合成非甾体抗炎药、抗肿瘤剂及抗菌化合物的关键中间体, 尤其适用于构建含三氟甲基的杂环骨架。其生物活性与分子刚性显著相关, 在先导化合物优化中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发与精细化工领域。具体用途包括: 作为抗炎药物塞来昔布类似物的合成前体; 用于制备三氟甲基取代的吡唑、异噁唑等五元杂环化合物; 在有机催化不对称反应中作为手性砌块。工业上可用于液晶材料单体及特种涂料的改性剂。实验级产品适用于高校与研究所的有机方法学开发。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 放置于阴凉干燥处, 建议温度 2-8°C 避光保存。长期储存需充氮气保护, 防止吸潮分解。开封后建议一次性使用完毕, 若需分次使用, 需严格隔绝空气与水分。操作时佩戴化学防护手套、护目镜及防毒面具, 避免吸入蒸气或接触皮肤。实验环境应配备通风橱, 远离氧化剂与强酸强碱。

## 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , GC-MS 验证无重大杂质。危险类别为刺激性物质 (GHS 分类: Eye Irrit. 2), 安全术语提示 S26 (接触眼睛立即冲洗)、S36/37 (穿戴防护装备)。运输按一般化学品处理, UN 编号无特殊要求。废弃物处置需符合当地法规, 建议采用专业化学废料公司回收。提供 COA (分析证书) 与 MSDS (材料安全数据表) 备索。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于医药、食品或家庭用途。具体应用前请查阅最新文献确认反应条件。