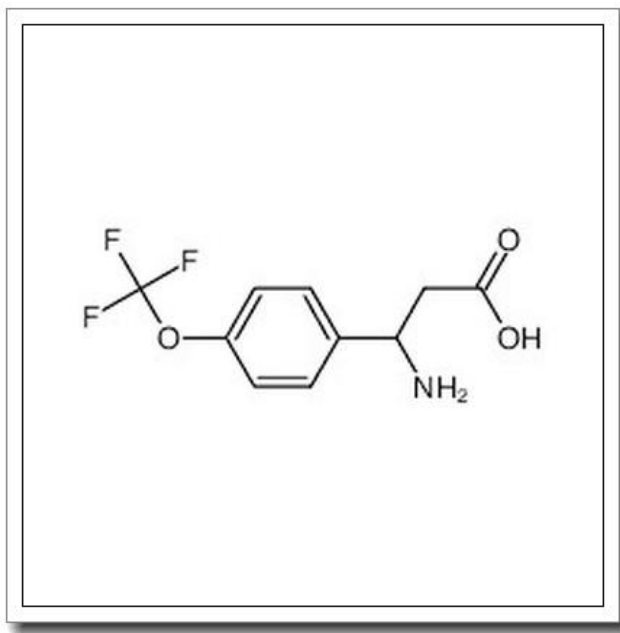


3-氨基-3-(4-三氟甲氧基苯基)-丙酸

3-amino-3-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-amino-3-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]propanoic acid
中文名称	3-氨基-3-(4-三氟甲氧基苯基)-丙酸
CAS 号	213192-56-4
分子式	C ₁₀ H ₁₀ F ₃ N ₃ O ₃
分子量	249.187
纯度	>96%

产品说明

3-氨基-3-(4-三氟甲氧基苯基)-丙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 3-amino-3-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]propanoic acid, CAS 号为 213192-56-4, 分子式为 C₁₀H₁₀F₃N₃O₃, 分子量 249.187。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%。该化合物含有一个氨基和一个羧基官能团, 苯环上的三氟甲氧基赋予其独特的电子效应和疏水性, 使其在有机溶剂中表现出中等溶解性, 而在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族氨基酸衍生物, 其结构模拟天然氨基酸特征, 可参与酶底物结合或抑制剂设计。三氟甲氧基的强吸电子性可能影响分子与生物靶标的相互作用, 在药物化学中常用于优化化合物的代谢稳定性和膜穿透性。该分子在神经递质类似物或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 配体研究中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发和生物化学研究领域。具体用途包括: 作为中间体用于合成小分子药物, 尤其是中枢神经系统 (CNS) 靶向药物; 在放射性标记实验中作为前体化合物; 作为结构修饰单元用于构效关系 (SAR) 研究。其衍生物可能用于抗抑郁、抗癫痫或抗炎药物的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中, 避免光照和湿度影响。开封后需充入惰性气体保护。使用前需恢复至室温并短暂离心以去除可能吸潮的结块。溶解推荐使用 DMSO 或乙醇, 工作浓度需通过预实验确定。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度通过 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 和质谱联用技术验证。残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明, 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应

佩戴防护眼镜和手套。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗用途。具体应用需结合实验体系进行充分验证。