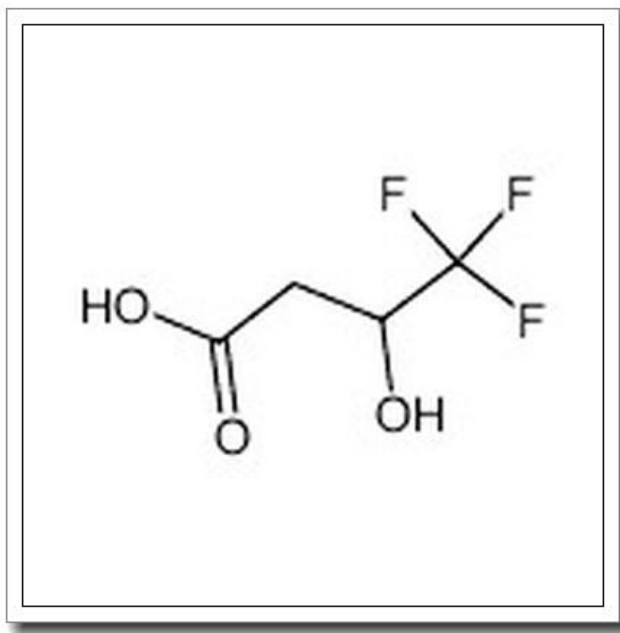


3-羟基-4,4,4-三氟丁酸

rac-4,4,4-trifluoro-3-hydroxybutanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>rac</i> -4,4,4-trifluoro-3-hydroxybutanoic acid
中文名称	3-羟基-4,4,4-三氟丁酸
CAS 号	86884-21-1
分子式	C ₄ H ₅ F ₃ O ₃
分子量	158.076
纯度	>96%

产品说明

3-羟基-4,4,4-三氟丁酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-羟基-4,4,4-三氟丁酸 (rac-4,4,4-trifluoro-3-hydroxybutanoic acid) 是一种含氟有机酸，化学式为 C₄H₅F₃O₃，分子量 158.076。该化合物为无色至淡黄色液体或结晶，纯度>96%，CAS 号为 86884-21-1。其结构特征为丁酸骨架的 3 位羟基取代和 4 位三氟甲基取代，兼具羧酸和醇的化学性质，易溶于极性有机溶剂（如甲醇、乙醇），微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟 β-羟基酸，该化合物在生物代谢途径中具有潜在调控作用，尤其是作为酶抑制剂或前体分子的研究靶点。三氟甲基的强吸电子效应可显著改变分子极性，增强其与生物大分子的相互作用，因此在药物化学中常用于优化先导化合物的代谢稳定性和靶向性。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域：

- 医药研发：作为含氟手性砌块，用于合成抗炎、抗肿瘤药物及蛋白酶抑制剂。
- 材料科学：用于制备含氟高分子单体，改善材料的耐候性和表面性能。
- 生化研究：作为代谢通路探针或同位素标记底物，研究氟代代谢物的生物学效应。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃至 4℃的干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF，水溶液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，批次间一致性控制在±2%。安全数据如下：

- 危险标识：具刺激性，可能引起眼睛和皮肤灼伤。

- 应急处理: 接触后立即用大量清水冲洗, 必要时就医。
- 运输分类: 非危险品, 但需符合一般化学品运输规范。

注: 具体实验方案请结合文献方法优化, 本说明不替代安全数据表 (SDS), 使用前请查阅完整安全信息。