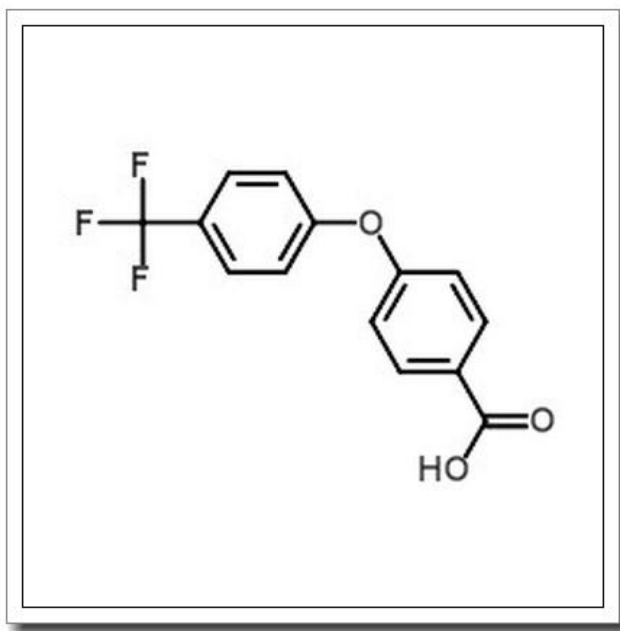


# 4-[4-(trifluoromethyl)phenoxy]benzoic acid

*4-[4-(trifluoromethyl)phenoxy]benzoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[4-(trifluoromethyl)phenoxy]benzoic acid
中文名称	4-[4-(三氟甲基)苯氧基]苯甲酸
CAS 号	78161-82-7
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> F <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	282.215
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-[4-(三氟甲基)苯氧基]苯甲酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-[4-(三氟甲基)苯氧基]苯甲酸 (CAS 号: 78161-82-7) 是一种含氟芳香族羧酸衍生物, 分子式为  $C_{14}H_9F_3O_3$ , 分子量 282.215。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有显著的疏水性和稳定性。其结构中的三氟甲基 (-CF<sub>3</sub>) 和苯氧基团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

该化合物可作为中间体参与多种生物活性分子的合成, 尤其是抗炎、抗肿瘤及抗菌药物的研发。其羧酸基团易于衍生化, 形成酯、酰胺或盐类衍生物, 拓展了其在药物设计中的应用。三氟甲基的引入可增强化合物的代谢稳定性和脂溶性, 对优化药物分子的药代动力学性质具有重要意义。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品常用于合成非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的类似物或前体化合物。在材料科学中, 可用于制备含氟液晶材料或高分子单体。此外, 在农药化学中, 其衍生物可作为除草剂或杀菌剂的活性成分。实验室中亦用作有机合成砌块, 或用于研究酶抑制机制的探针分子。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在 2-8°C 以延长稳定性。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 避免吸湿和氧化。使用时需佩戴防护手套、护目镜及实验服, 在通风橱中操作。溶解性测试表明, 本品易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 微溶于水, 需根据实验需求选择合适的溶剂体系。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表 (SDS) 显示其急性毒性为低毒 (LD<sub>50</sub> >2000 mg/kg, 大鼠经口), 但对眼睛和皮肤有轻微刺激

性。废弃处理需遵循当地法规，不可直接排入下水道。运输分类为非危险品，但建议避免与强氧化剂共存。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。建议使用者查阅最新文献并开展小试以确定适用性。