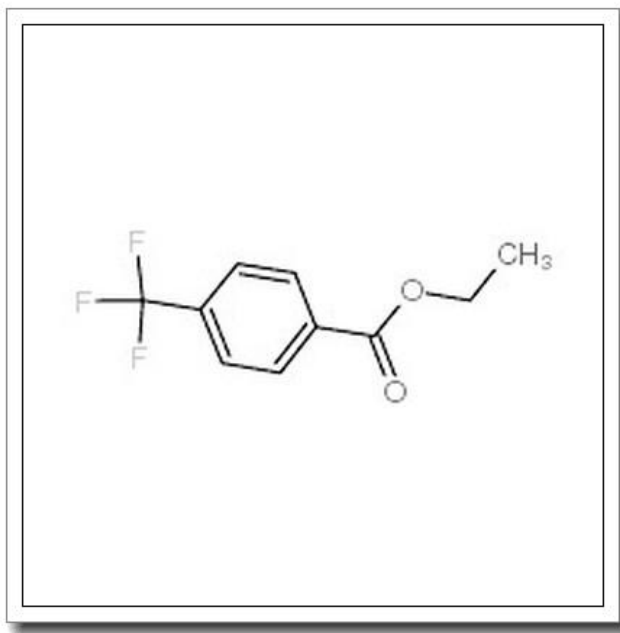


# 4-(三氟甲基)苯甲酸乙酯

*Ethyl 4-(trifluoromethyl)benzoate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4-(trifluoromethyl)benzoate
中文名称	4-(三氟甲基)苯甲酸乙酯
CAS 号	583-02-8
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> F <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	218.172
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-(三氟甲基)苯甲酸乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-(三氟甲基)苯甲酸乙酯 (Ethyl 4-(trifluoromethyl)benzoate, CAS 号 583-02-8) 是一种含氟芳香族化合物, 分子式为  $C_{10}H_9F_3O_2$ , 分子量 218.172。本品为无色至淡黄色液体, 具有酯类特征气味, 沸点较高 (约 210-215° C), 密度 1.25 g/cm<sup>3</sup>, 折射率 n<sub>20/D</sub> 1.456。其结构中三氟甲基 (-CF<sub>3</sub>) 的强吸电子效应与苯甲酸乙酯骨架的协同作用, 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

该化合物在生物化学领域主要作为合成砌块, 其三氟甲基的引入可显著改变母体分子的脂溶性、代谢稳定性和生物活性。在药物化学中, 三氟甲基化是优化先导化合物的重要策略, 能增强药物分子的膜穿透性和靶标结合能力。此外, 其酯基可通过水解反应转化为羧酸, 进一步拓展合成应用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品用于合成抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的含氟衍生物。农药领域用于制备高效杀虫剂和除草剂, 三氟甲基可提高农药的环境稳定性。材料科学中可作为液晶单体或高分子改性剂的原料。实验室中常用于氟化学研究及交叉偶联反应的底物。

#### 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 2-8° C 冷藏), 避免光照和湿气。与强氧化剂、强酸强碱分开存放。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套、护目镜及实验服。若需长期保存, 建议充入惰性气体 (如氮气) 保护。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 水分含量 ≤0.5%, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 该物质对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类: Xi), 操作后需彻底清洗接触

部位。若不慎吸入，应立即转移至空气新鲜处。废弃物处理需遵守当地化学品管理法规，建议通过专业机构焚烧处置。

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优化。更多技术参数可索取 COA 报告。