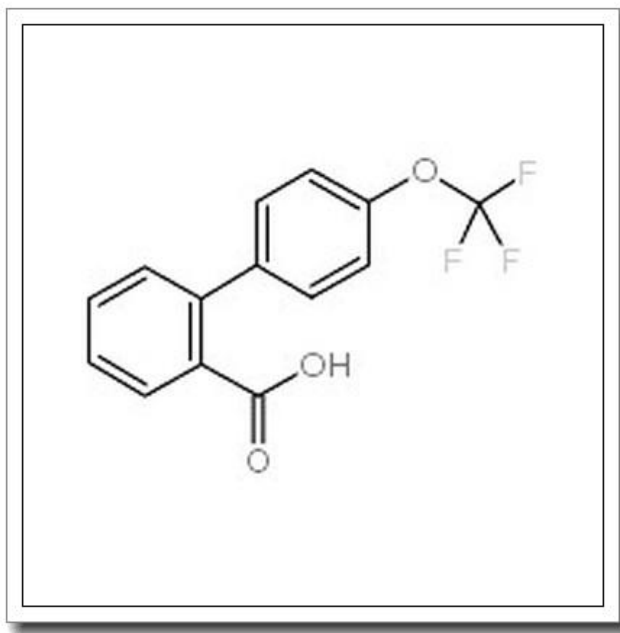


4'-(三氟甲氧基)-联苯-2-甲酸

2-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]benzoic acid
中文名称	4'-(三氟甲氧基)-联苯-2-甲酸
CAS 号	408366-18-7
分子式	C ₁₄ H ₉ F ₃ O ₃
分子量	282.215
纯度	>96%

产品说明

2-[4-(三氟甲氧基)苯基]苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]benzoic acid, 中文名为 4'-(三氟甲氧基)-联苯-2-甲酸, CAS 号为 408366-18-7。其分子式为 C₁₄H₉F₃O₃, 分子量为 282.215, 常温下为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%。该化合物具有联苯骨架结构, 苯环 2 位羧基与 4 位三氟甲氧基的独特组合, 赋予其显著的疏水性和电子效应, 在有机溶剂如甲醇、乙腈中溶解性良好, 水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物, 三氟甲氧基的强吸电子特性可显著调节分子极性及其生物活性。羧基的存在使其易于衍生化为酯类或酰胺类化合物, 在药物化学中常用于先导化合物结构修饰。该分子可干扰酶活性位点或作为氢键供体/受体, 在抑制剂设计中具有潜在价值, 尤其适用于靶向 G 蛋白偶联受体 (GPCRs) 或激酶的研究。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和材料科学领域。在药物开发中, 可作为非甾体抗炎药 (NSAIDs) 或抗肿瘤化合物的中间体; 在材料领域, 用于合成液晶材料或有机电致发光器件 (OLED) 的功能单体。具体用途包括:

- 新型镇痛剂或抗炎药的分子骨架构建
- 含氟高分子材料的改性单体
- 学术研究中作为荧光探针的合成前体

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, 避免光照及潮湿。开封后需充入惰性气体保护, 长期储存建议分装使用。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO 或乙醇, 配制溶液建议现配现用, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，HPLC 检测显示单一主峰。安全数据表明其具有刺激性，皮肤接触可能引起红肿，操作时应避免吸入粉尘。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例，不可直接排入下水道。

（注：实际应用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展风险评估）