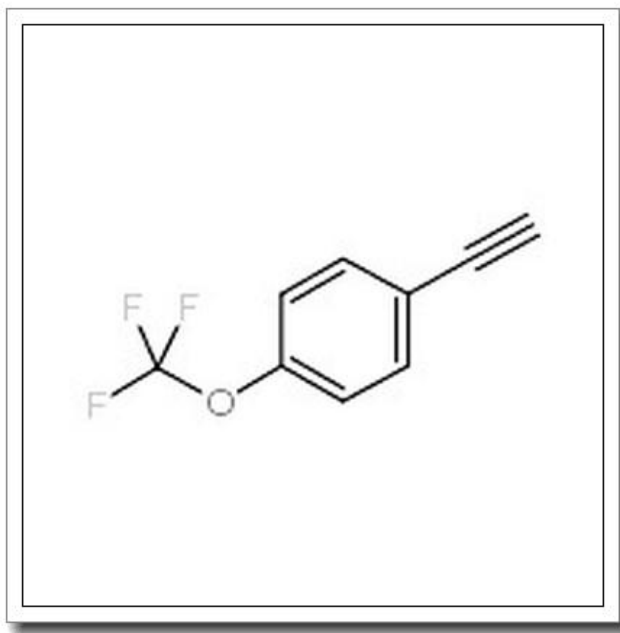


# 4-三氟甲氧基苯乙炔

*1-ethynyl-4-(trifluoromethoxy)benzene*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-ethynyl-4-(trifluoromethoxy)benzene
中文名称	4-三氟甲氧基苯乙炔
CAS 号	160542-02-9
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> F <sub>3</sub> O
分子量	186.131
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-乙炔基-4-(三氟甲氧基)苯 (1-ethynyl-4-(trifluoromethoxy)benzene)，中文名称为 4-三氟甲氧基苯乙炔，是一种含氟芳香族炔烃化合物。其 CAS 号为 160542-02-9，分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>5</sub>F<sub>3</sub>O，分子量为 186.131。该化合物常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体，具有较高的化学稳定性，纯度标准大于 96%。其结构中同时包含炔基和三氟甲氧基团，赋予其独特的电子效应和反应活性，适用于多种有机合成反应。

### 2. 生物化学功能与重要性

4-三氟甲氧基苯乙炔在生物化学领域主要作为关键中间体用于构建含氟药物分子。三氟甲氧基的强吸电子特性可显著改变母体分子的脂溶性和代谢稳定性，而炔基则为点击化学 (Click Chemistry) 提供反应位点。该化合物在药物研发中常用于靶向蛋白修饰、荧光标记探针合成以及 PET 示踪剂前体的制备，是开发抗肿瘤和中枢神经系统药物的重要砌块。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、材料科学和农业化学领域。在医药研发中，用于合成酪氨酸激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂；在材料领域，可作为液晶单体或有机半导体材料的合成前体；在农药化学中，用于构建高效含氟杀虫剂。具体应用包括但不限于：Suzuki 偶联反应的底物、Sonogashira 交叉偶联的炔烃组分、以及通过 1,3-偶极环加成反应制备三唑类衍生物。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气或氮气）保护下密封储存，温度控制在 -20° C 至 4° C 范围内，避免光照和潮湿环境。开封后需尽快使用，未用完的试剂应重新充惰性气体密封。使用时应佩戴防化手套、护目镜，并在通风橱中操作。溶解性测试表明，该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于醇类，不溶于水。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 GC-MS 双重检测，确保纯度 >96%，水分含量 <0.5%。危险类别为刺激性物质（GHS 分类：Skin Irrit. 2），安全数据表（SDS）编号为 CHEM-EF-160542。应急处理措施包括：皮肤接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟，吸入暴露需转移至空气新鲜处。废弃物处置需符合当地法规，建议采用专业化学废弃物焚烧处理。