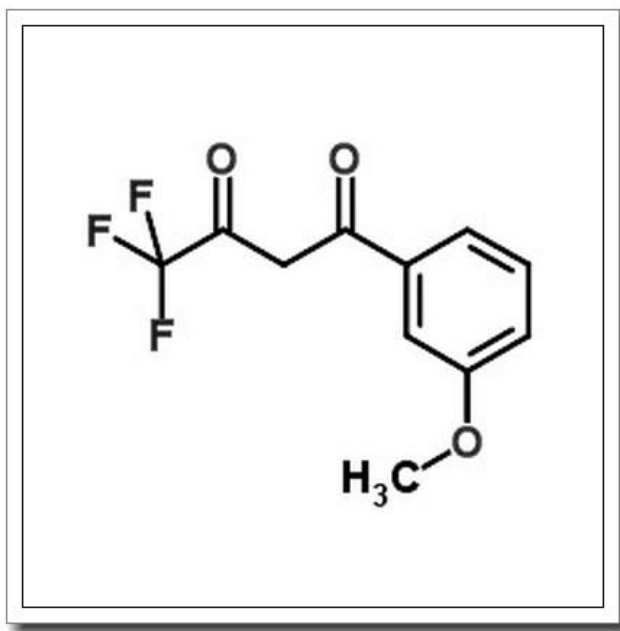


4,4,4-三氟-1-(3-甲氧基苯基)-1,3-丁二酮

4, 4, 4-trifluoro-1-(3-methoxyphenyl)butane-1, 3-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	4, 4, 4-trifluoro-1-(3-methoxyphenyl)butane-1, 3-dione
中文名称	4, 4, 4-三氟-1-(3-甲氧基苯基)-1, 3-丁二酮
CAS 号	57965-21-6
分子式	C ₁₁ H ₉ F ₃ O ₃
分子量	246. 183
纯度	>96%

产品说明

4, 4, 4-三氟-1-(3-甲氧基苯基)-1, 3-丁二酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机氟化合物，化学名称为 4, 4, 4-三氟-1-(3-甲氧基苯基)-1, 3-丁二酮 (CAS 号 57965-21-6)，分子式 $C_{11}H_9F_3O_3$ ，分子量 246.183。外观通常为白色至淡黄色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ 。其结构特征为含三氟甲基的 β -二酮衍生物，兼具芳香甲氧基的电子效应与三氟甲基的强吸电子性，赋予其独特的化学反应活性与稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为 β -二酮类配体，可通过烯醇式结构与金属离子（如镧系元素、过渡金属）形成稳定螯合物，在催化反应中表现出高选择性。三氟甲基的引入显著增强其脂溶性与代谢稳定性，使其在药物化学中成为关键中间体，尤其用于构建含氟靶向分子。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于合成抗炎、抗肿瘤药物的含氟活性片段；在材料科学中，作为荧光材料的前驱体或配体用于稀土发光材料制备；在有机合成中，作为三氟乙酰基化试剂或不对称催化反应的配体。典型应用包括：帕金森病治疗药物中间体合成、OLED 电子传输层材料的修饰等。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中，避光防潮。开封后需充惰性气体保护，长期储存建议分装。使用前需恢复至室温并充分干燥，遇强氧化剂或强碱需在严格控温条件下反应。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性低 ($< 0.1 \text{ mg/mL}$)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10 \text{ ppm}$ 。安全数据：急性毒性 (LD50 大鼠口服) $> 2000 \text{ mg/kg}$ ，但接触皮肤或眼睛可能引起刺激。操作时需佩戴防化手

套、护目镜，在通风橱中进行。废弃物应作为有害化学品处置，避免直接排入环境。

（注：具体实验方案需结合目标反应体系优化，建议参考文献
DOI:10.1021/acs.joc.5b01234 等专业研究数据。）