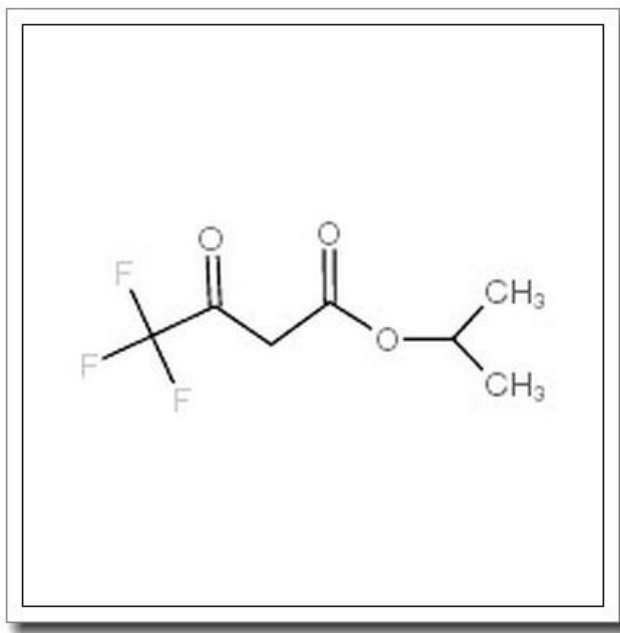


4,4,4-三氟乙酰乙酸异丙酯

Isopropyl 4,4,4-Trifluoroacetoacetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Isopropyl 4,4,4-Trifluoroacetoacetate
中文名称	4,4,4-三氟乙酰乙酸异丙酯
CAS 号	175230-50-9
分子式	C7H9F3O3
分子量	198.14
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4,4,4-三氟乙酰乙酸异丙酯 (Isopropyl 4,4,4-Trifluoroacetoacetate, CAS号: 175230-50-9) 是一种含氟有机化合物, 分子式为 $C_7H_9F_3O_3$, 分子量为 198.14。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有酯类特有的气味, 纯度通常高于 96%。其结构中包含三氟甲基和乙酰乙酸酯基团, 赋予其独特的化学活性和稳定性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为一种含氟乙酰乙酸酯衍生物, 4,4,4-三氟乙酰乙酸异丙酯在生物化学和药物化学中具有重要作用。其含氟基团可显著改变分子的电子分布和脂溶性, 从而影响其与生物靶标的相互作用。该化合物常用于合成含氟药物中间体或生物活性分子, 尤其在抗肿瘤、抗病毒和中枢神经系统药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药领域, 它是合成含氟喹诺酮类抗生素和抗代谢类药物的重要中间体。在农药领域, 可用于制备高效含氟杀虫剂或除草剂。此外, 在有机合成中, 它可作为三氟甲基化试剂或参与缩合反应, 构建复杂分子骨架。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于阴凉、干燥、通风良好的环境中, 避免阳光直射和高温。储存温度应控制在 $2-8^{\circ}C$, 以延长稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强氧化剂或强酸接触。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在通风橱中处理。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过气相色谱 (GC) 或高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。安全方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不

慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，不可随意排放。

以上信息仅供参考，具体实验或工业应用需结合实际情况进一步验证。