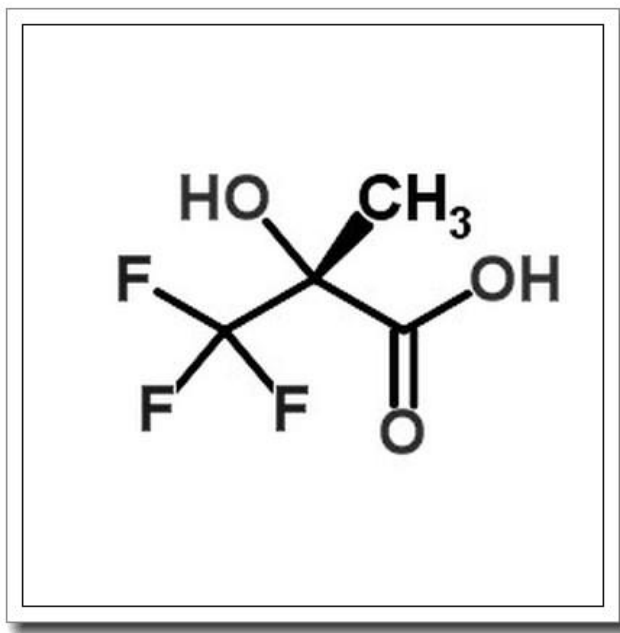


(R)-3,3,3-三氟-2-羟基-2-甲基丙酸

(R)-2-Hydroxy-2-(Trifluoromethyl)Propionic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-2-Hydroxy-2-(Trifluoromethyl)Propionic Acid
中文名称	(R)-3,3,3-三氟-2-羟基-2-甲基丙酸
CAS 号	44864-47-3
分子式	C ₄ H ₅ F ₃ O ₃
分子量	158.076
纯度	>96%

产品说明

(R)-2-羟基-2-(三氟甲基)丙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(R)-2-Hydroxy-2-(Trifluoromethyl)Propionic Acid, 中文名为(R)-3,3,3-三氟-2-羟基-2-甲基丙酸, CAS 号为 44864-47-3。其分子式为 $C_4H_5F_3O_3$, 分子量为 158.076, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物为手性有机酸, 含有一个羟基和一个强吸电子三氟甲基基团, 具有显著的立体选择性和化学稳定性。常温下为白色至类白色结晶粉末, 易溶于极性有机溶剂(如甲醇、乙腈), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟手性砌块, 该分子中的三氟甲基可显著改变母体化合物的脂溶性、代谢稳定性和生物活性。羟基与羧基的存在使其成为合成复杂手性分子的关键中间体, 尤其在构建 β -羟基酸结构时具有不可替代性。其(R)-构型在药物研发中常用于模拟天然生物分子的立体构象, 例如用于蛋白酶抑制剂或抗菌剂的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 用于合成抗病毒药物(如 HIV 蛋白酶抑制剂)和抗炎剂的手性前体; 在农药化学中, 可作为高效除草剂或杀虫剂的活性组分修饰基团; 在先进材料领域, 可用于制备含氟液晶单体或特种聚合物。典型反应包括酯化、酰胺化及不对称催化转化。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体(如氮气)保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试推荐先以少量 DMSO 助溶, 再稀释至目标溶剂体系。长期储存需定期检测纯度(HPLC 或 NMR)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、MS 及手性色谱分析验证, 确保对映体过量(ee 值) $\geq 98\%$ 。潜在危害包括皮肤刺激性(GHS 分类 Category 2)和眼睛损伤(Category 1), 操作时

需遵守化学品通用防护规范。废弃物处理应参照当地有机氟化合物处置法规。提供 COA（质量分析证书）及 MSDS（材料安全数据表）备索。

注：本说明基于当前研究数据，具体应用需结合实验条件优化。