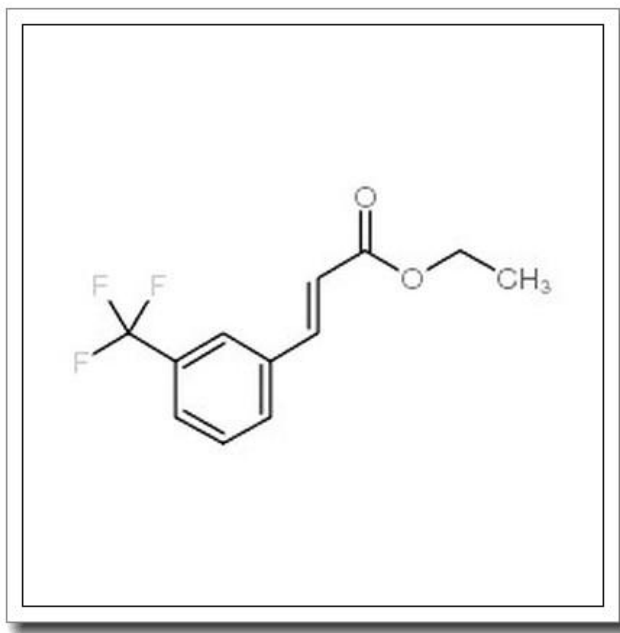


# 间三氟甲基肉桂酸乙酯

*ethyl 3-[3-(trifluoromethyl)phenyl]prop-2-enoate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 3-[3-(trifluoromethyl)phenyl]prop-2-enoate
中文名称	间三氟甲基肉桂酸乙酯
CAS 号	113048-68-3
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> F <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	244.21
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

间三氟甲基肉桂酸乙酯 (ethyl 3-[3-(trifluoromethyl)phenyl]prop-2-enoate) 是一种有机化合物，化学式为  $C_{12}H_{11}F_3O_2$ ，分子量为 244.21。该化合物属于肉桂酸酯类衍生物，结构中包含一个三氟甲基 (-CF<sub>3</sub>) 取代基，赋予其独特的电子效应和疏水性。其 CAS 号为 113048-68-3，纯度通常高于 96%，外观为无色至淡黄色液体或固体，具体形态取决于储存条件。该化合物在有机合成中表现出较高的反应活性，尤其在构建含氟芳香族结构中具有重要价值。

### 2. 生物化学功能与重要性

间三氟甲基肉桂酸乙酯在生物化学领域主要作为中间体用于合成更复杂的含氟化合物。三氟甲基的引入可显著改变分子的物理化学性质，如增强脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透能力。这类结构在药物化学中尤为重要，常见于抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的设计中。此外，其烯酸酯结构可通过进一步反应转化为酰胺、羧酸或其他功能基团，扩展了其在药物研发中的应用范围。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中，它是合成三氟甲基化先导化合物的关键中间体，可用于探索新型抗病毒或抗增殖剂。在农药领域，含三氟甲基的衍生物常作为高效杀虫剂或杀菌剂的活性成分。此外，在功能材料领域，该化合物可作为液晶单体或高分子材料的改性剂，改善材料的耐热性和光学性能。

### 4. 储存条件与使用建议

间三氟甲基肉桂酸乙酯需密封保存于阴凉干燥处，推荐温度为 2-8°C，避免光照和潮湿环境。长期储存建议充入惰性气体（如氮气）以降低氧化风险。使用时应佩戴防护手套、护目镜及实验服，并在通风良好的环境中操作。若需溶解，推荐使用无水乙醇、二甲基亚砜 (DMSO) 等有机溶剂，避免与强氧化剂或强酸接触。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $\geq 96\%$ ，并提供完整的质谱（MS）和核磁共振（NMR）分析数据支持。安全方面，该化合物可能对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需严格遵守化学品安全规范。如接触皮肤，应立即用大量清水冲洗；若误入眼睛，需用生理盐水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品处理规范处置，避免直接排放至环境中。