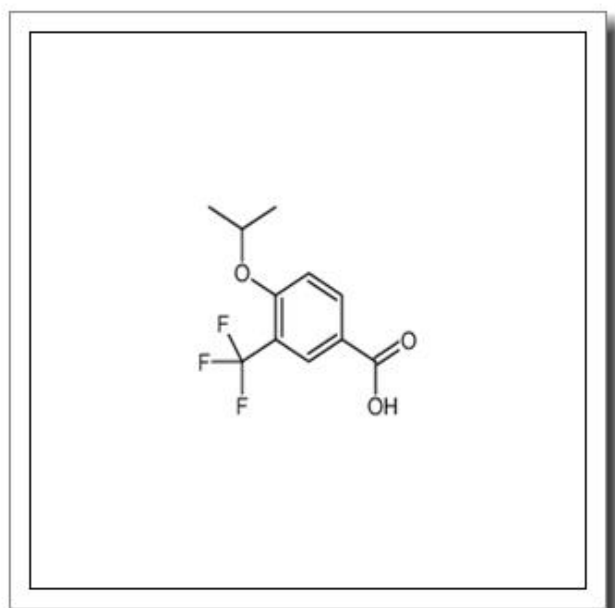


# 4-propan-2-yloxy-3-(trifluoromethyl)benzoic acid

*4-propan-2-yloxy-3-(trifluoromethyl)benzoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-propan-2-yloxy-3-(trifluoromethyl)benzoic acid
中文名称	4-propan-2-yloxy-3-(trifluoromethyl)benzoic acid
CAS 号	213598-16-4
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> F <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	248.198
纯度	≥96%

## 产品说明

### 4-propan-2-yloxy-3-(trifluoromethyl)benzoic acid 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 4-propan-2-yloxy-3-(三氟甲基)苯甲酸，CAS 号为 213598-16-4，分子式  $C_{11}H_{11}F_3O_3$ ，分子量 248.198。其结构中含有一个苯甲酸母核，2-丙氧基取代基及三氟甲基官能团，赋予其独特的极性和疏水性平衡。纯度  $\geq 96\%$  (HPLC)，熔点为  $128-132^{\circ}C$ ，易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯甲酸衍生物，可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应，同时三氟甲基的强吸电子效应使其成为药物化学中重要的中间体。其结构特性可用于调节分子脂溶性，增强靶标结合能力，在酶抑制剂设计和受体调节剂开发中具有显著价值。

#### 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、抗肿瘤及中枢神经系统药物的关键中间体。农用化学品中可用于开发高效除草剂或杀虫剂。此外，在材料科学中可作为液晶材料的改性单元或高分子聚合物的功能化单体。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，工作浓度需通过预实验优化。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检，符合国际标准。安全数据表明其对皮肤和眼睛有轻微刺激性 (GHS 分类: Warning)，操作时应避免直接接触。如遇意外吸入，需立即转移至空气新鲜处。废弃物处置需遵守当地化学品管理法规。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件验证。更多技术参数可索取 COA 报告。