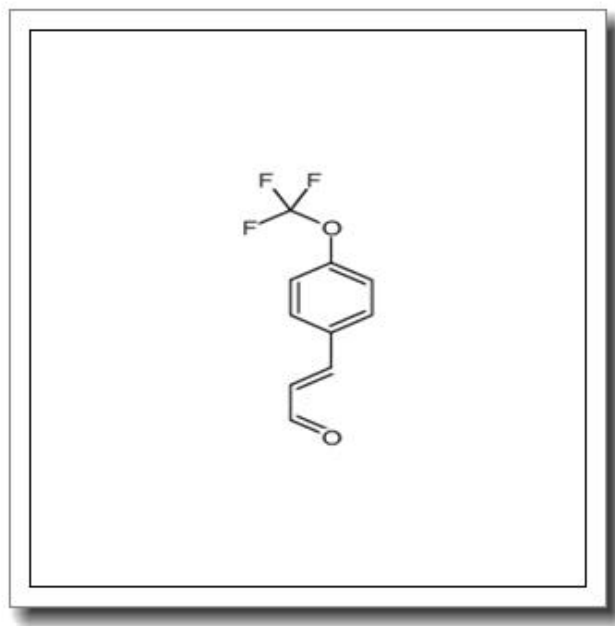


# 4-三氟甲氧基肉桂醛

*(2E)-3-[4-(Trifluoromethoxy)phenyl]acrylaldehyde*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(2E)-3-[4-(Trifluoromethoxy)phenyl]acrylaldehyde
中文名称	4-三氟甲氧基肉桂醛
CAS 号	681484-59-3
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> F <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	216.157
纯度	≥96%

## 产品说明

### 4-三氟甲氧基肉桂醛产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-三氟甲氧基肉桂醛（化学名称：(2E)-3-[4-(Trifluoromethoxy)phenyl]acrylaldehyde）是一种含氟芳香族丙烯醛衍生物，CAS 号为 681484-59-3，分子式 C<sub>10</sub>H<sub>7</sub>F<sub>3</sub>O<sub>2</sub>，分子量 216.157。本品为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度 ≥96%，具有典型的 α, β-不饱和醛结构特征，其分子中的三氟甲氧基（-OCF<sub>3</sub>）赋予其独特的电子效应和疏水性，显著影响其化学反应活性及生物活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其丙烯醛骨架和三氟甲氧基的协同作用，表现出显著的亲电性和共轭体系稳定性，可作为迈克尔加成反应的受体。在生物体系中，其结构类似天然肉桂醛衍生物，可能参与调控氧化应激和炎症相关通路，在药物化学中常用于构建先导化合物的核心片段。三氟甲氧基的引入可增强代谢稳定性，提高跨膜能力，对开发中枢神经系统药物具有重要意义。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体，广泛应用于药物研发领域，特别是抗炎、抗肿瘤及神经退行性疾病药物的合成。在材料科学中，用于制备含氟液晶单体或光电材料前体。此外，可作为生化试剂用于研究酶抑制机制（如醛脱氢酶家族）或作为荧光探针的修饰基团。具体实验中常用于克级规模的有机合成反应，需在惰性气体保护下进行进一步衍生化。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，开封后需充氮密封保存。因含 α, β-不饱和醛结构，易发生聚合反应，长期保存建议添加 0.1% BHT 稳定剂。使用时应佩戴防尘口罩、丁腈手套及护目镜，操作环境需通风良好。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF，避免与强亲核试剂直接接触。

## 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间保留时间偏差 $\leq 0.5\%$ 。核磁共振（ $^1\text{H}/^{13}\text{C}$  NMR）和质谱（HRMS）用于结构确证。本品对呼吸道和皮肤有刺激性，LD<sub>50</sub>（大鼠经口）为 320 mg/kg，属于危险化学品。泄漏处理需用惰性吸附材料收集，废液按含氟有机废物处置。运输分类为 UN 2811，需符合危险品运输条例。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）