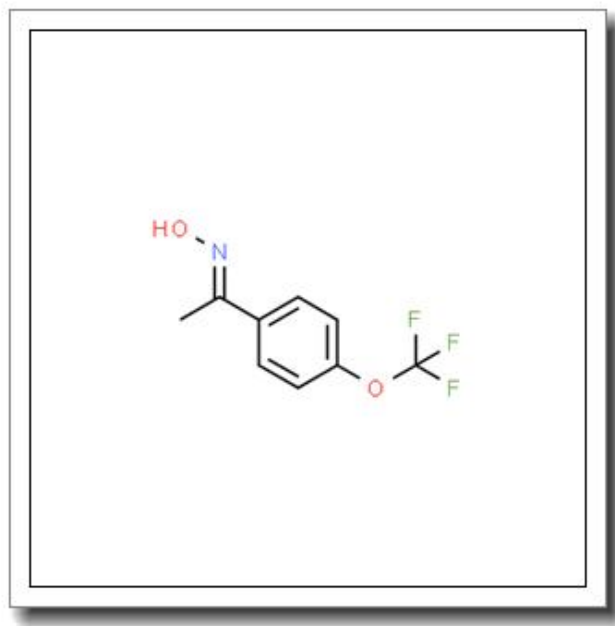


(E)-1-(4-(三氟甲氧基)苯基)乙酮肟

Ethanone, 1-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]-, oxime, (1E)-



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethanone, 1-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]-, oxime, (1E)-
中文名称	(E)-1-(4-(三氟甲氧基)苯基)乙酮肟
CAS 号	1265612-59-6
分子式	C ₉ H ₈ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	219.16
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(E)-1-(4-(三氟甲氧基)苯基)乙酮肟 (CAS 号 1265612-59-6) 是一种含氟有机化合物, 分子式为 $C_9H_8F_3NO_2$, 分子量 219.16。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中包含三氟甲氧基 ($-OCF_3$) 和肟基 ($=N-OH$) 官能团, 赋予其独特的化学稳定性和反应活性。该物质易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为乙酮肟类衍生物, 该化合物在生物化学领域表现出显著的活性。三氟甲氧基的强吸电子效应可增强分子与靶标蛋白的结合能力, 而肟基则可能参与金属离子螯合或作为前药活化位点。其结构特性使其成为药物研发中重要的中间体, 尤其在抗炎、抗肿瘤和中枢神经系统药物设计中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药领域的合成研究。在医药方面, 可作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的构建模块; 在农药领域, 可用于开发新型杀虫剂或除草剂。此外, 它还可作为有机合成中的保护基团或用于材料科学中的含氟功能材料制备。实验室研究中常用于探索含氟化合物的构效关系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^\circ C$ 下避光保存于干燥环境中, 开封后需充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时优先选用无水有机溶剂, 若需水相反应建议先进行助溶处理。反应体系中需注意肟基在强酸/强碱条件下的不稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 并符合核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 的结构确证标准。安全数据表明其急性毒性较低 ($LD_{50} > 500 \text{ mg/kg}$), 但仍可能引起眼睛和皮肤

刺激。操作时应在通风橱中进行，废弃物需按危险化学品规范处置。储存容器应标注 GHS 分类标签，包括警示符号和风险声明（H315/H319）。

注：具体实验方案需结合目标反应体系优化，建议参考文献报道的类似物合成方法。