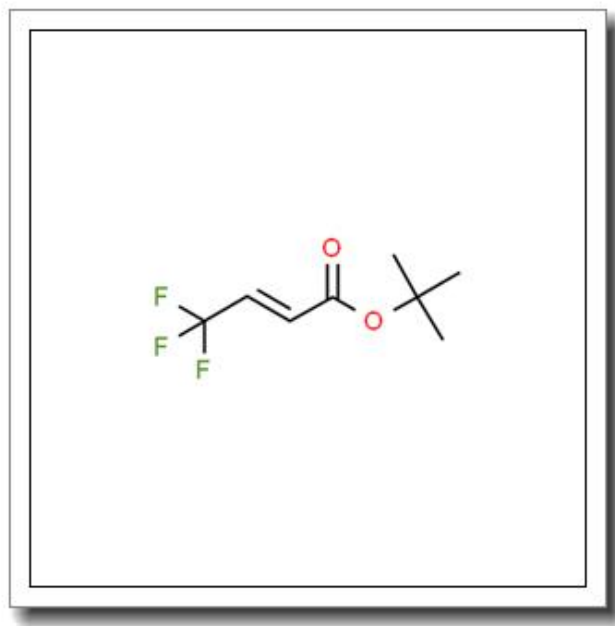


(E)4,4,4-三氟丁-2-烯酸叔丁酯

2-Butenoic acid, 4,4,4-trifluoro-, 1,1-dimethylethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Butenoic acid, 4,4,4-trifluoro-, 1,1-dimethylethyl ester
中文名称	(E)4,4,4-三氟丁-2-烯酸叔丁酯
CAS 号	78762-71-7
分子式	C ₈ H ₁₁ F ₃ O ₂
分子量	196.17
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(E)4,4,4-三氟丁-2-烯酸叔丁酯 (CAS 号: 78762-71-7) 是一种含氟有机化合物, 分子式为 $C_8H_{11}F_3O_2$, 分子量为 196.17。该化合物为无色至淡黄色液体, 纯度通常 $\geq 96\%$, 具有特定的烯酸酯结构, 其中三氟甲基的引入显著增强了其化学稳定性和反应活性。其叔丁酯基团提供了良好的保护作用, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为中间体或修饰基团, 用于合成含氟药物或功能材料。三氟甲基的强电负性和疏水性使其在药物设计中能够改善分子的代谢稳定性和生物利用度。此外, 其烯酸酯结构可作为迈克尔受体参与亲核加成反应, 在复杂分子构建中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

(E)4,4,4-三氟丁-2-烯酸叔丁酯广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成含氟抗炎药、抗肿瘤化合物的重要前体; 在农药领域, 可用于制备高效含氟杀虫剂或除草剂; 在材料科学中, 可作为功能单体参与含氟聚合物的合成, 赋予材料特殊的耐候性和化学惰性。

4. 储存条件与使用建议

该产品需密封保存于阴凉干燥处, 建议储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 避免光照和潮湿环境。开封后应充惰性气体 (如氮气) 保护以延长保质期。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 GC 分析确保纯度 $\geq 96\%$, 并提供完整的质检报告 (COA)。其安全信息如下: 可能引起皮肤和眼睛刺激, 吸入或误食有害。操作时应遵循 GHS 标准, 远离火源和氧化剂。废弃处理需符合当地环保法规, 建议通过专业化学品回收机构处置。

以上信息仅供参考, 具体实验或生产应用需结合实际情况进一步验证。