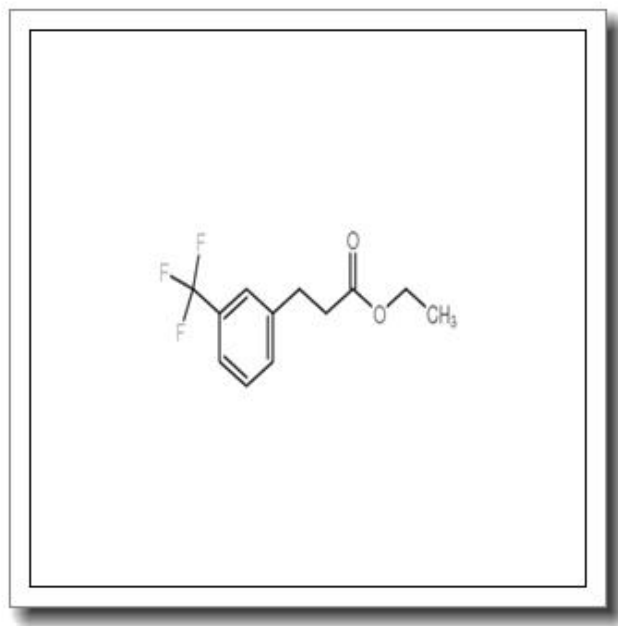


间三氟甲基苯丙酸乙酯

ethyl 3-[3-(trifluoromethyl)phenyl]propanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 3-[3-(trifluoromethyl)phenyl]propanoate
中文名称	间三氟甲基苯丙酸乙酯
CAS 号	70311-33-0
分子式	C ₁₂ H ₁₃ F ₃ O ₂
分子量	246.226
纯度	≥96%

产品说明

间三氟甲基苯丙酸乙酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

间三氟甲基苯丙酸乙酯 (ethyl 3-[3-(trifluoromethyl)phenyl]propanoate) 是一种有机化合物, CAS 号为 70311-33-0, 分子式为 $C_{12}H_{13}F_3O_2$, 分子量为 246.226。本品为无色至淡黄色液体, 纯度 $\geq 96\%$, 具有酯类特有的气味。其结构中含有一个三氟甲基苯基团和一个丙酸乙酯基团, 赋予其良好的脂溶性和化学稳定性, 适合作为有机合成中间体或生化试剂使用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域的重要性主要体现在其作为合成中间体的作用。三氟甲基的引入可显著改变分子的电子分布和疏水性, 从而影响其与生物大分子 (如蛋白质或酶) 的相互作用。这类结构在药物化学中常用于优化先导化合物的代谢稳定性和生物活性。

3. 主要应用领域与具体用途

间三氟甲基苯丙酸乙酯广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在药物研发中, 它是合成非甾体抗炎药、抗抑郁剂等活性分子的关键中间体。在农药领域, 可用于制备含三氟甲基的杀虫剂或除草剂。此外, 其酯基结构也适用于高分子材料的改性或功能化。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于阴凉、干燥、通风良好的环境中, 避免光照和高温。推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 长期存放建议充入惰性气体保护。使用时应穿戴防护手套和护目镜, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。操作区域需配备通风设施。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质量分析报告 (COA)。安全信息方面, 其属于刺激性化学品, 可能引起皮肤或眼睛刺激。若不慎接触, 应立即用

大量清水冲洗并就医。运输和处置需符合当地化学品管理法规，避免释放至环境中。

(全文共计 436 字)