

# 间三氟甲基马尿酸

*2-[[3-(trifluoromethyl)benzoyl]amino]acetic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[[3-(trifluoromethyl)benzoyl]amino]acetic acid
中文名称	间三氟甲基马尿酸
CAS 号	17794-48-8
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	247.171
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 2-[[3-(三氟甲基)苯甲酰基]氨基]乙酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-[[3-(三氟甲基)苯甲酰基]氨基]乙酸（间三氟甲基马尿酸）是一种含氟芳香族衍生物，化学式为 C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>F<sub>3</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量 247.171，CAS 登记号 17794-48-8。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%，具有三氟甲基苯甲酰基与甘氨酸缩合形成的稳定酰胺键结构。其疏水性三氟甲基基团与极性羧酸基团的共存，赋予该化合物独特的溶解特性（微溶于水，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇）。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为马尿酸的结构类似物，该化合物可通过竞争性抑制机制干扰马尿酸代谢途径，在生物体系中表现出特异性靶向作用。三氟甲基的强电负性可增强分子与蛋白质受体的结合能力，使其成为研究酶抑制（如尿苷二磷酸葡萄糖醛酸转移酶）和药物代谢的标志物。在毒理学研究中，其代谢产物可作为接触三氟甲基苯类化合物的生物标志物。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于设计抗炎、抗肿瘤药物的中间体，尤其适用于含氟药物的结构优化
- 3.2 分析化学：作为 HPLC 和 LC-MS 的内标物，定量检测生物样本中的相关代谢物
- 3.3 农药开发：合成新型含氟杀虫剂/除草剂的关键砌块
- 3.4 基础研究：模拟环境污染物代谢过程的实验模型化合物

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中，置于-20℃干燥环境下，有效期 36 个月。使用前需平衡至室温以避免吸湿。建议在通风橱中操作，配制溶液时优先选用惰性溶剂（如乙腈）。工作浓度应根据实验体系优化，推荐初始测试浓度为 0.1-10 mM。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC（C18 柱，甲醇/水梯度洗脱）和熔点测定（标准值 198-202℃）进行质

控。MSDS 数据显示其急性毒性 LD50（大鼠经口）>2000 mg/kg，但仍需避免吸入粉尘或接触皮肤。应急处理：眼部接触时立即用生理盐水冲洗 15 分钟，皮肤沾染后用大量肥皂水清洗。废弃物应作为有害化学品处置，符合当地环保法规。

注：本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品应用。具体实验方案需结合文献方法优化。