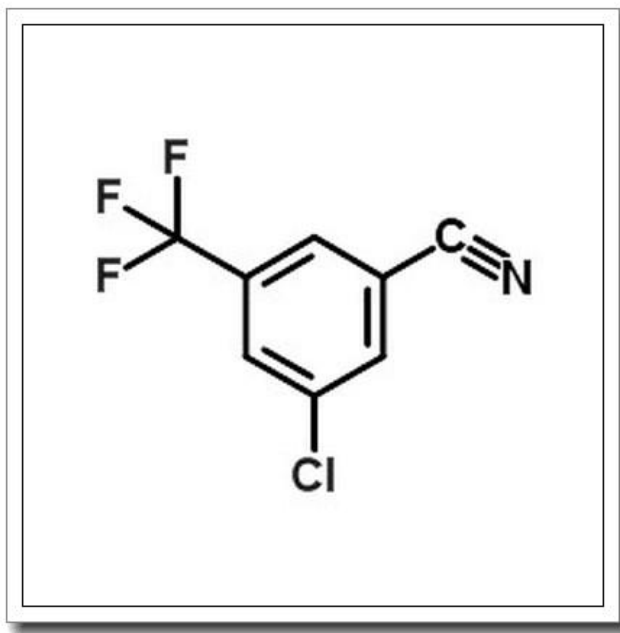


3-氯-5-(三氟甲基)苯甲腈

3-Chloro-5-(trifluoromethyl)benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Chloro-5-(trifluoromethyl)benzonitrile
中文名称	3-氯-5-(三氟甲基)苯甲腈
CAS 号	693245-52-2
分子式	C ₈ H ₃ ClF ₃ N
分子量	205.564
纯度	>96%

产品说明

3-氯-5-(三氟甲基)苯甲腈产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-氯-5-(三氟甲基)苯甲腈 (英文名称: 3-Chloro-5-(trifluoromethyl)benzonitrile) 是一种含卤素和氰基的芳香族化合物, CAS 号为 693245-52-2, 分子式为 $C_8H_3ClF_3N$, 分子量为 205.564。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 >96%, 具有较高的化学稳定性。其结构中三氟甲基和氯原子的强吸电子效应使其成为有机合成中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要用于药物分子设计和农药活性成分的合成。其独特的电子分布和空间结构可增强与生物靶点的相互作用, 常用于开发抗肿瘤、抗炎及抗感染类药物。此外, 三氟甲基的引入能显著提高化合物的代谢稳定性和脂溶性, 因此在先导化合物优化中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氯-5-(三氟甲基)苯甲腈广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂的关键中间体; 在农药领域, 可用于制备高效杀虫剂和除草剂; 在材料科学中, 可作为液晶材料或高分子单体的修饰基团。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 推荐储存温度为 2-8°C。使用时应穿戴防护手套、护目镜和实验服, 在通风橱中操作。避免与强氧化剂或强酸接触, 以防发生副反应。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 >96%。安全信息显示, 该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时需遵循化学品通用防护规范。如不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处置法规处理。