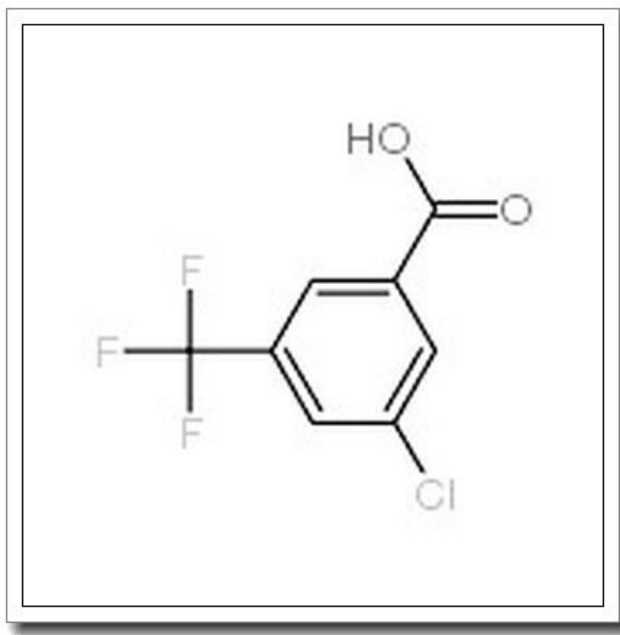


3-氯-5-三氟甲基苯甲酸

3-Chloro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Chloro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid
中文名称	3-氯-5-三氟甲基苯甲酸
CAS 号	53985-49-2
分子式	C ₈ H ₄ ClF ₃ O ₂
分子量	224.564
纯度	>96%

产品说明

3-氯-5-三氟甲基苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氯-5-三氟甲基苯甲酸（英文名：3-Chloro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid）是一种含氯和氟取代基的苯甲酸衍生物，化学式为 $C_8H_4ClF_3O_2$ ，分子量为 224.564，CAS 号为 53985-49-2。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度高于 96%，具有芳香羧酸和卤代烃的双重化学特性。其结构中三氟甲基和氯原子的强吸电子效应使其羧基具有较高的反应活性，易参与酯化、酰胺化等反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸类化合物的衍生物，该物质可通过修饰生物分子结构影响其理化性质。三氟甲基的引入显著增强化合物的脂溶性和代谢稳定性，而氯原子则可能提供特定的空间位阻效应。这些特性使其在药物化学中成为重要的中间体，尤其用于设计靶向酶或受体的抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中，常用于构建抗炎、抗肿瘤或抗菌化合物的核心骨架；在材料科学中，可作为液晶材料或高分子单体的前体。具体用途包括但不限于：

- 合成含三氟甲基的活性药物成分（API）
- 作为配体或催化剂组分参与过渡金属催化反应
- 用于研究卤代芳烃的偶联反应机理

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存于 2-8℃ 环境中，长期保存需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，微溶于水，建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵守当地危险化学品管理条例，不可直接排放至环境中。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验体系进一步验证。）