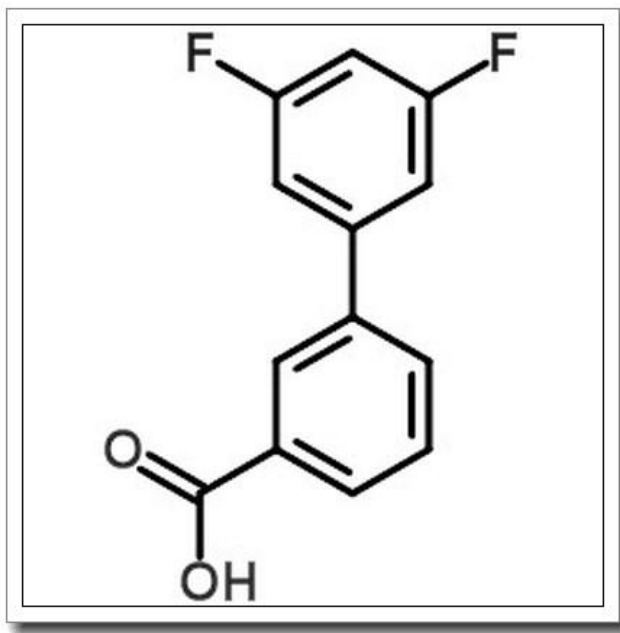


3,5-二氟-联苯-3-羧酸

3-(3,5-difluorophenyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(3,5-difluorophenyl)benzoic acid
中文名称	3,5-二氟-联苯-3-羧酸
CAS 号	177734-83-7
分子式	C ₁₃ H ₈ F ₂ O ₂
分子量	234.198
纯度	>96%

产品说明

3-(3,5-二氟苯基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(3,5-二氟苯基)苯甲酸 (英文名称: 3-(3,5-difluorophenyl)benzoic acid) 是一种含氟芳香族羧酸化合物, CAS 号为 177734-83-7, 分子式为 $C_{13}H_8F_2O_2$, 分子量为 234.198。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度通常大于 96%。其结构中包含二氟苯基和苯甲酸基团, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族化合物, 3-(3,5-二氟苯基)苯甲酸因其氟原子的强电负性和小原子半径, 能够显著改变分子的极性、脂溶性和代谢稳定性。这类结构常见于药物活性分子中, 可用于调节靶蛋白结合亲和力或改善药物动力学性质。其在激酶抑制剂、抗炎药物和抗菌剂的设计中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体和有机合成领域。在药物研发中, 可作为构建块用于合成更复杂的活性分子, 尤其是含氟药物候选物。此外, 它也用于材料科学中液晶材料或高分子单体的合成。具体用途包括但不限于: 作为激酶抑制剂的羧酸片段、抗肿瘤药物前体的修饰基团, 以及功能材料的结构单元。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度保持在 $2-8^{\circ}C$, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强氧化剂接触。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

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供完整的质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 数据支持。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时

应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品处置法规。

本产品仅供科研用途，不适用于食品、药品或家用。具体应用前请查阅相关文献并评估安全性。