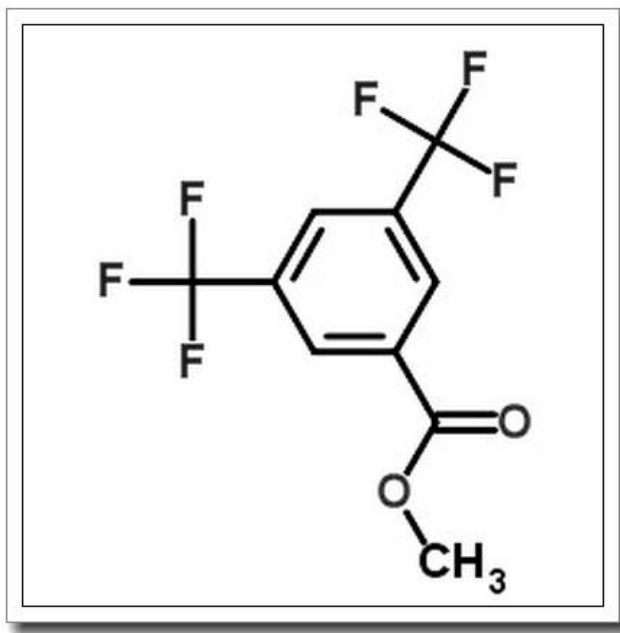


3,5-双(三氟甲基)苯甲酸甲酯

methyl 3,5-bis(trifluoromethyl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3,5-bis(trifluoromethyl)benzoate
中文名称	3,5-双(三氟甲基)苯甲酸甲酯
CAS 号	26107-80-2
分子式	C ₁₀ H ₆ F ₆ O ₂
分子量	272.144
纯度	>96%

产品说明

3, 5-双(三氟甲基)苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3, 5-双(三氟甲基)苯甲酸甲酯 (methyl 3, 5-bis(trifluoromethyl)benzoate) 是一种含氟芳香族化合物，化学式为 $C_{10}H_6F_6O_2$ ，分子量 272.144，CAS 号为 26107-80-2。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体，具有显著的疏水性和化学稳定性，其结构中两个三氟甲基的强吸电子效应使其成为有机合成中的重要中间体。产品纯度高于 96%，需避光保存以避免分解。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物，该化合物在生物化学领域主要用于修饰药物分子或生物活性物质，以增强其脂溶性、代谢稳定性和靶向性。三氟甲基的引入可显著改变母体分子的电子分布和空间位阻，从而影响其与生物大分子（如酶或受体）的相互作用。其在药物研发中常用于先导化合物的结构优化。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药化学中，它是合成抗肿瘤、抗病毒药物（如蛋白酶抑制剂）的关键中间体。在农药领域，可用于制备高效含氟杀虫剂或除草剂。此外，在特种材料领域，其衍生物可作为液晶单体或光学材料的构建单元。具体用途包括 Suzuki 偶联反应、酯交换反应等有机转化中的底物或试剂。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的惰性气体（如氮气）环境下避光储存，长期保存需置于干燥器中。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入蒸气。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。潜在危害包括皮肤

刺激性（GHS 分类 Category 2）和眼损伤风险（Category 1），操作时应佩戴防护手套、护目镜及实验服。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按有害化学品规范处置，禁止直接排入环境。安全数据表（SDS）可随货提供。