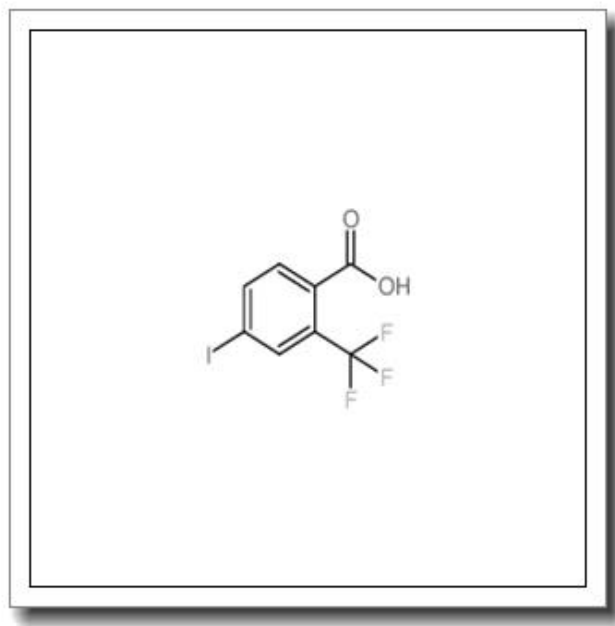


2-甲酸-5-碘三氟甲苯

4-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzoic acid
中文名称	2-甲酸-5-碘三氟甲苯
CAS 号	954815-11-3
分子式	C ₈ H ₄ F ₃ I ₂ O ₂
分子量	316.016
纯度	≥96%

产品说明

4-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzoic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzoic acid (中文名: 2-甲酸-5-碘三氟甲苯) 是一种含碘芳香族羧酸衍生物, CAS 号为 954815-11-3, 分子式为 $C_8H_4F_3IO_2$, 分子量 316.016。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的疏水性和稳定性。其结构中的碘原子和羧酸基团赋予其独特的反应活性, 而三氟甲基的强吸电子效应使其在亲电取代反应中表现出高选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为有机合成中间体, 该化合物在生物化学领域主要用于构建含氟或碘的功能分子。碘原子的引入使其可作为放射性标记前体 (如碘-125 标记), 而羧酸基团便于进一步衍生化为酯、酰胺等活性结构。三氟甲基的存在能显著调节分子的脂溶性和代谢稳定性, 因此在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品是合成抗肿瘤、抗病毒药物 (如蛋白酶抑制剂) 的关键砌块。材料科学领域用于制备含氟液晶单体或光电材料。其还可作为配体用于过渡金属催化反应, 或通过 Suzuki 偶联等反应构建复杂芳香体系。分析化学中可用作 HPLC 检测的内标物。

4. 储存条件与使用建议

需避光密封保存于 -20°C 干燥环境中, 有效期 24 个月。开封后建议充惰性气体保护。使用前需恢复至室温以避免结露, 称量应在通风橱中进行。溶解性测试表明其易溶于 DMF、DMSO 等极性非质子溶剂, 微溶于甲醇, 难溶于水。实验级使用推荐纯度 $\geq 96\%$, 若用于放射性标记需经额外纯化。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质检, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明该物质对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎

接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物需按危险化学品规范处置，避免与强氧化剂混储。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件验证。）