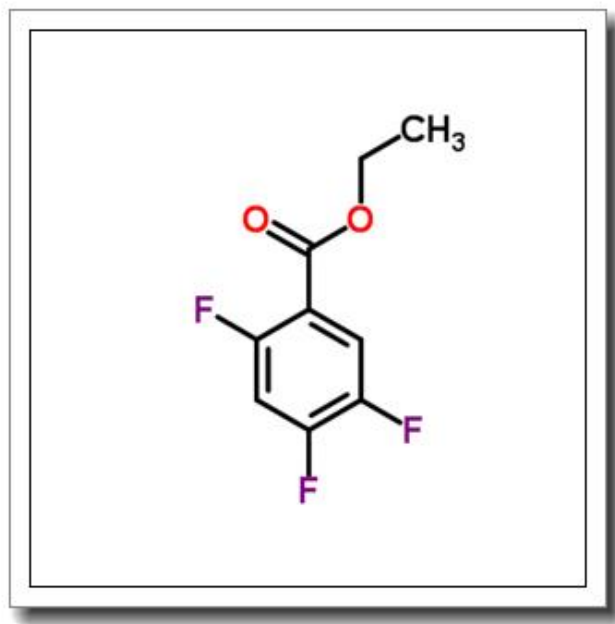


2,4,5-三氟苯甲酸乙酯

Ethyl 2,4,5-trifluorobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 2,4,5-trifluorobenzoate
中文名称	2,4,5-三氟苯甲酸乙酯
CAS 号	351354-41-1
分子式	C ₉ H ₇ F ₃ O ₂
分子量	204.146
纯度	≥ 96%

产品说明

2, 4, 5-三氟苯甲酸乙酯产品说明书

产品概述与化学特性

2, 4, 5-三氟苯甲酸乙酯 (Ethyl 2, 4, 5-trifluorobenzoate) 是一种含氟芳香族化合物, 化学式为 $C_9H_7F_3O_2$, 分子量 204.146, CAS 号为 351354-41-1。本品为无色至淡黄色液体, 具有酯类特征气味, 密度约为 1.29 g/cm^3 , 沸点约 $195\text{--}198^\circ\text{C}$ 。其结构中苯环上的三氟取代基赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在有机合成中表现出高反应活性。纯度 $\geq 96\%$, 杂质主要为同系物及微量水分。

生物化学功能与重要性

作为含氟苯甲酸衍生物, 该化合物是合成含氟药物和农药的关键中间体。氟原子的引入可显著改善母体分子的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性, 在药物设计中用于优化药代动力学特性。在生物化学研究中, 其酯基可作为保护基或进一步转化的活性位点, 广泛应用于蛋白酶抑制剂和受体配体的结构修饰。

主要应用领域与具体用途

1. 医药领域: 用于合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的含氟活性成分, 如 HIV 蛋白酶抑制剂类似物。
2. 农药化学: 作为新型含氟杀虫剂和除草剂的合成前体, 例如三氟甲基吡啶类化合物的制备。
3. 材料科学: 参与液晶材料及特种高分子单体的合成, 改善材料的耐热性和光学性能。
4. 科研用途: 在有机氟化学研究中作为标准参照物或反应底物, 用于亲核取代、偶联反应等机理探索。

储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 放置于阴凉干燥处, 建议温度 $2\text{--}8^\circ\text{C}$, 避光保存。与强氧化剂、强酸强碱分开存放。使用时应佩戴防化手套、护目镜, 在通风橱中操作。若需

长期保存，建议充入惰性气体（如氮气）保护。开封后请尽快使用，避免吸湿导致水解。

质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度，GC-MS 确认结构，水分含量 \leq 0.5%。安全数据：皮肤接触可能引起轻微刺激，眼睛接触需立即用大量清水冲洗 15 分钟。若不慎吸入，应转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地环保法规，建议采用专业化学废弃物焚烧方式。更多安全信息请参阅 SDS 第 3-8 章节。