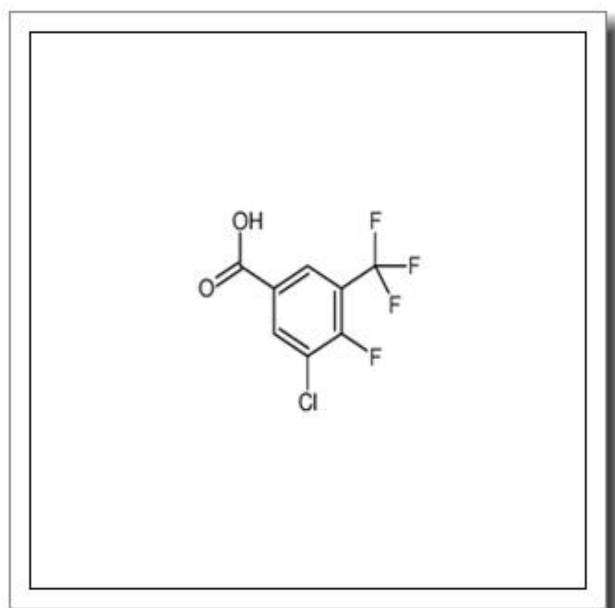


3-chloro-4-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid

3-chloro-4-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-chloro-4-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid
中文名称	3-chloro-4-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid
CAS 号	381229-48-7
分子式	C ₈ H ₃ ClF ₄ O ₂
分子量	242.555
纯度	≥96%

产品说明

3-chloro-4-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 3-chloro-4-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoic acid, CAS 号 381229-48-7, 分子式 C₈H₃ClF₄O₂, 分子量 242.555。其结构中包含氯、氟及三氟甲基等强吸电子基团，赋予该化合物独特的电子效应和空间位阻特性。纯度 ≥96% (HPLC)，熔点为 128-132°C，易溶于有机溶剂如甲醇、乙腈，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为多卤代苯甲酸衍生物，该化合物可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应，同时卤素原子可作为活性位点进行亲核取代。三氟甲基的引入显著增强其脂溶性和代谢稳定性，使其在药物化学中成为重要的中间体，尤其适用于设计靶向酶活性中心的抑制剂类分子。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药领域。在医药研发中，可作为构建抗菌、抗肿瘤化合物的关键片段，例如用于合成含氟喹诺酮类抗生素。在农药领域，其衍生物可用于开发高效除草剂和杀虫剂。此外，在材料科学中可用于制备含氟液晶单体或高分子改性剂。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以防降解。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试推荐优先使用 DMF 或 DMSO 等极性非质子溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱严格质检，确保批次稳定性。安全数据表明，其急性毒性 (LD₅₀) 为 500 mg/kg (大鼠，口服)，属于刺激性物质。接触皮肤或眼睛时需

立即用大量清水冲洗 15 分钟，并就医。废弃物处理应遵循当地危险化学品管理条例。

注：以上信息基于现有实验数据，具体应用需进一步验证。采购后请参阅随货提供的 MSDS 获取完整安全指引。