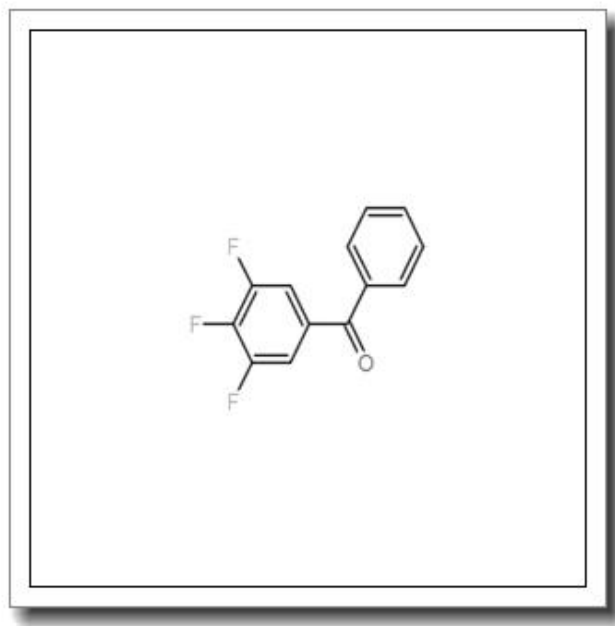


3,4,5-三氟苯甲酮

phenyl-(3,4,5-trifluorophenyl)methanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	phenyl-(3,4,5-trifluorophenyl)methanone
中文名称	3,4,5-三氟苯甲酮
CAS 号	70028-88-5
分子式	C ₁₃ H ₇ F ₃ O
分子量	236.189
纯度	≥96%

产品说明

3, 4, 5-三氟苯甲酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3, 4, 5-三氟苯甲酮 (phenyl-(3, 4, 5-trifluorophenyl)methanone) 是一种含氟芳香酮类化合物, CAS 号为 70028-88-5, 分子式 $C_{13}H_7F_3O$, 分子量 236.189。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的芳香酮类化学性质, 如羰基的亲电性和苯环的稳定性。其结构中三氟取代基赋予分子强电子效应和疏水性, 使其在有机合成中表现出独特反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟有机中间体, 3, 4, 5-三氟苯甲酮的氟原子可增强分子脂溶性和代谢稳定性, 在药物设计中常用于改善化合物穿透细胞膜的能力。其结构中的苯甲酮骨架是构建光引发剂、液晶材料及药物活性分子的关键片段, 尤其在抗炎、抗肿瘤等小分子抑制剂开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 可作为合成 EGFR 抑制剂、激酶调节剂等靶向药物的中间体; 在农药领域用于制备含氟杀虫剂或除草剂; 在材料科学中, 可作为液晶显示材料的单体或光固化树脂的光敏剂组分。实验室中常用于研究氟代芳烃的亲核取代反应机理。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于干燥、阴凉处 (建议 $2-8^{\circ}C$), 避免光照和潮湿环境。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 难溶于水, 反应体系中需注意溶剂极性选择。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。本品属于刺激性化学品, CAS 标识号 70028-88-5, UN 编号非管制。安全数据表 (SDS) 显示其

急性毒性类别为 4 级 ($LD_{50} > 2000$ mg/kg)，但仍需佩戴防护手套和护目镜。废弃物处理应遵守当地有机氟化合物处置法规。

注：本产品仅供科研用途，不适用于食品、药品或家庭用途。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证适用性。