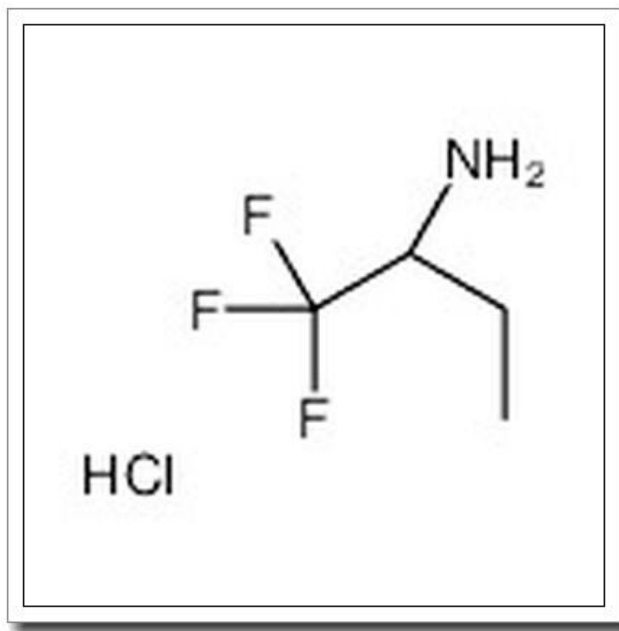


(R)-1,1,1-三氟-2-丁胺盐酸盐

(2R)-1,1,1-trifluorobutan-2-amine, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2R)-1,1,1-trifluorobutan-2-amine, hydrochloride
中文名称	(R)-1,1,1-三氟-2-丁胺盐酸盐
CAS 号	1212120-62-1
分子式	C ₄ H ₉ ClF ₃ N
分子量	163.569
纯度	>96%

产品说明

(R) -1, 1, 1-三氟-2-丁胺盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 (2R) -1, 1, 1-trifluorobutan-2-amine hydrochloride, 中文名 (R) -1, 1, 1-三氟-2-丁胺盐酸盐, CAS 号 1212120-62-1, 分子式 C₄H₉ClF₃N, 分子量 163.569。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%, 具有手性中心 (R 构型), 其结构中含三氟甲基及胺基盐酸盐官能团, 易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、乙醇), 在水溶液中呈弱酸性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟手性胺类化合物, 其三氟甲基的强吸电子效应可显著改变分子电子分布, 增强代谢稳定性, 在药物化学中常用于构建生物活性分子的核心骨架。胺基盐酸盐形式提高了化合物的水溶性和结晶性, 便于纯化与制剂。其手性特征对立体选择性合成及受体靶向研究具有关键意义。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成, 特别适用于抗病毒药物、蛋白酶抑制剂及中枢神经系统药物的手性结构单元开发。在农药领域可用于含氟杀虫剂前体制备。此外, 在不对称催化反应中可作为配体或催化剂组分, 优化反应立体选择性。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8℃ 干燥避光环境中, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需在干燥器内存放, 避免吸湿。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解推荐使用无水乙醇或 DMF, 避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度>96%, 手性 HPLC 验证对映体过量值 (ee) ≥99%。产品符合 ACS 标准, 批号关联完整谱图 (COA 提供 HNMR、MS 及 HPLC 数据)。安全数据: LD₅₀ (大鼠口服) 约 500 mg/kg, 皮肤刺激性类别 2, 操作后需彻底清洗暴露部位。废弃物处置需符合危险化学品规范。

注：本说明基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。