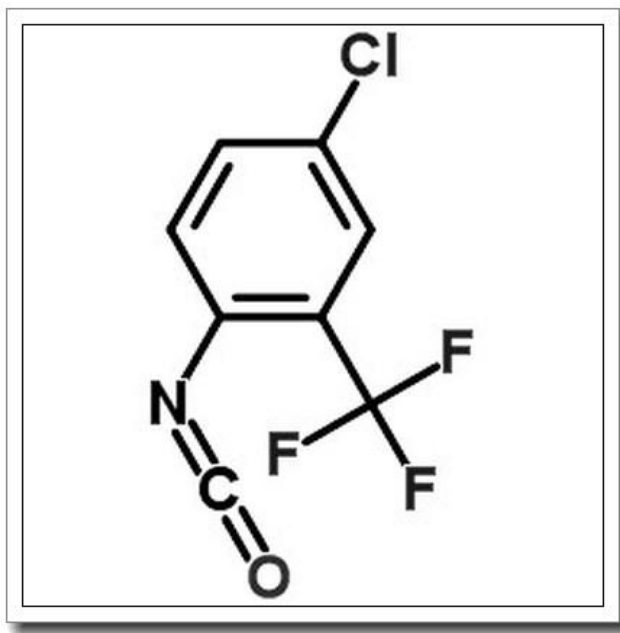


4-氯-2-三氟甲基苯基异氰酸酯

4-Chloro-2-(trifluoromethyl)phenyl isocyanate



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Chloro-2-(trifluoromethyl)phenyl isocyanate
中文名称	4-氯-2-三氟甲基苯基异氰酸酯
CAS 号	16588-69-5
分子式	C ₈ H ₃ ClF ₃ N ₁ O ₁
分子量	221.564
纯度	>96%

产品说明

4-氯-2-三氟甲基苯基异氰酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氯-2-三氟甲基苯基异氰酸酯 (4-Chloro-2-(trifluoromethyl)phenyl isocyanate) 是一种有机异氰酸酯类化合物, 化学式为 $C_8H_3ClF_3NO$, 分子量为 221.564。其 CAS 号为 16588-69-5, 常温下为无色至淡黄色液体, 具有刺激性气味。该化合物含有高反应活性的异氰酸酯基团 ($-NCO$), 可与羟基、氨基等亲核基团发生加成反应, 生成氨基甲酸酯或脲类衍生物。其结构中氯原子和三氟甲基的引入增强了电子效应, 使其在有机合成中表现出独特的反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为异氰酸酯类化合物, 该产品在生物化学领域主要用于构建杂环骨架或修饰生物分子。其异氰酸酯基团可与蛋白质、多肽或糖类分子中的活性基团特异性结合, 常用于生物偶联反应或标记技术。三氟甲基的强吸电子特性可调节分子极性, 提升衍生物的代谢稳定性, 在药物化学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药中间体、农药合成及材料科学领域。在医药研发中, 用于合成含三氟甲基的脲类或氨基甲酸酯类活性分子; 在农药领域, 可作为杀虫剂或杀菌剂的关键前体; 在材料科学中, 参与聚氨酯交联反应以改善材料耐候性。此外, 还可作为分析试剂用于质谱标记或荧光探针修饰。

4. 储存条件与使用建议

需严格密封保存于干燥、阴凉处 (建议 $2-8^{\circ}C$), 避免与湿气接触。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 在通风橱中操作。开封后建议充氮保护以延长保存期限。运输中需分类为危险化学品, 避免与强氧化剂、酸碱类物质混装。

5. 质量控制与安全信息

本产品纯度经 HPLC 验证 $>96\%$, 含水率 $<0.1\%$ 。安全数据表明其具有强刺激性, 接

触皮肤或眼睛可能引起灼伤，吸入蒸气会导致呼吸道损伤。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃处理应遵循当地法规，采用碱性水解或专业焚烧方式。

（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。）