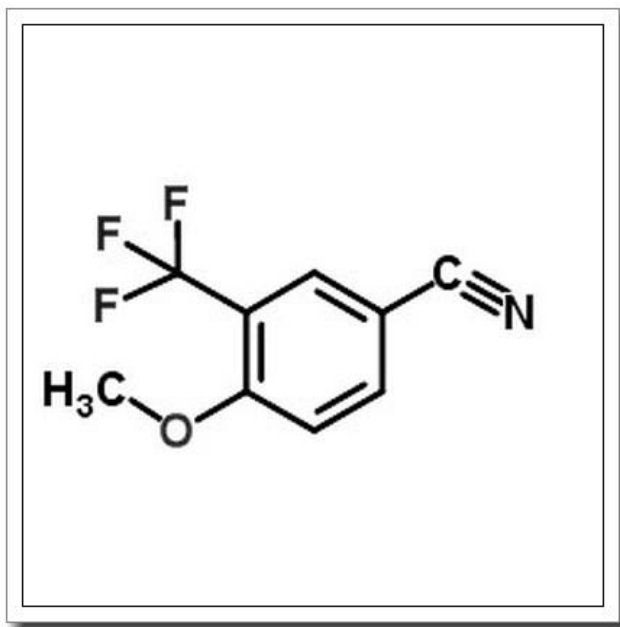


4-甲氧基-3-三氟甲基苯甲腈

4-methoxy-3-(trifluoromethyl)benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-methoxy-3-(trifluoromethyl)benzonitrile
中文名称	4-甲氧基-3-三氟甲基苯甲腈
CAS 号	261951-87-5
分子式	C ₉ H ₆ F ₃ N ₁ O
分子量	201.145
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-甲氧基-3-三氟甲基苯甲腈 (4-methoxy-3-(trifluoromethyl)benzotrile) 是一种含氟芳香族化合物, CAS 号为 261951-87-5, 分子式为 $C_9H_6F_3NO$, 分子量为 201.145。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的甲氧基和三氟甲基取代基赋予其独特的电子效应和疏水性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯甲腈衍生物, 其腈基 (-CN) 和三氟甲基 (-CF₃) 的引入增强了其生物活性和代谢稳定性。三氟甲基的存在可显著提高化合物的脂溶性和靶标结合能力, 而甲氧基则可能参与氢键相互作用。这些特性使其成为药物研发中常见的中间体, 尤其在抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物设计中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

4-甲氧基-3-三氟甲基苯甲腈主要用于医药和农药领域的合成中间体。在医药领域, 它可作为构建块用于合成含三氟甲基的活性分子, 例如激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。在农药化学中, 其结构特征可用于开发高效低毒的杀虫剂或除草剂。此外, 该化合物还可用于材料科学中液晶材料的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 2-8°C 为宜。使用时需在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。开封后应尽快使用, 剩余部分需重新密封保存。溶解性测试表明, 该化合物易溶于有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。使用时需佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免与强氧化剂接触。若意外接触皮肤或眼睛, 应立即用大量清水

冲洗并就医。其安全数据表（SDS）显示，该化合物可能对水生生物有毒，需按危险化学品规范处置废弃物。运输和储存应符合化学品管理相关法规。