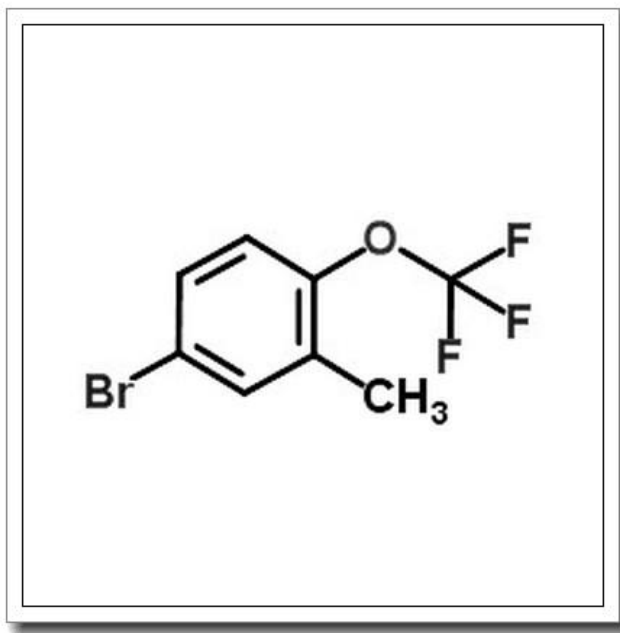


5-溴-2-(三氟甲氧基)甲苯

4-bromo-2-methyl-1-(trifluoromethoxy)benzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-bromo-2-methyl-1-(trifluoromethoxy)benzene
中文名称	5-溴-2-(三氟甲氧基)甲苯
CAS 号	887268-26-0
分子式	C ₈ H ₆ BrF ₃ O
分子量	255.032
纯度	>96%

产品说明

5-溴-2-(三氟甲氧基)甲苯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-(三氟甲氧基)甲苯 (化学名称: 4-bromo-2-methyl-1-(trifluoromethoxy)benzene) 是一种含溴和氟的芳香族化合物, CAS 号为 887268-26-0, 分子式为 $C_8H_6BrF_3O$, 分子量为 255.032。该化合物常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有较高的化学稳定性。其结构中包含三氟甲氧基和溴取代基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性, 适合作为有机合成中间体或功能材料的前体。

2. 生物化学功能与重要性

作为卤代芳烃衍生物, 该化合物在生物化学领域主要用于药物分子和农药的合成。三氟甲氧基的强吸电子性可调节母体分子的脂溶性和代谢稳定性, 而溴原子则为后续偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 提供活性位点。其在药物研发中常用于构建中枢神经系统药物或抗炎分子的核心骨架, 具有较高的结构修饰潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

医药中间体: 用于合成含三氟甲氧基的活性药物成分 (API), 如抗抑郁剂或抗菌剂。

农药化学: 作为高效杀虫剂或除草剂的合成前体, 利用其卤素活性增强靶标结合能力。

材料科学: 可作为液晶材料或特种聚合物的功能性单体, 改善材料的热稳定性和光学性能。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体 (如氮气)。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。

使用建议：操作时需在通风橱中进行，佩戴防化手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，推荐使用前通过 TLC 或 HPLC 监测纯度。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：批次产品经 HPLC 分析确认纯度>96%，残留溶剂符合 USP 标准。提供 COA（质量分析证书）及 NMR、MS 谱图。

安全信息：该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，CAS 号 887268-26-0 未列入剧毒物质名录，但需遵守 GHS 分类中的预防措施（H315-H319）。废弃物处理应参照当地有机卤化物处置法规，禁止直接排入水体。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需进一步验证其安全性和合规性。