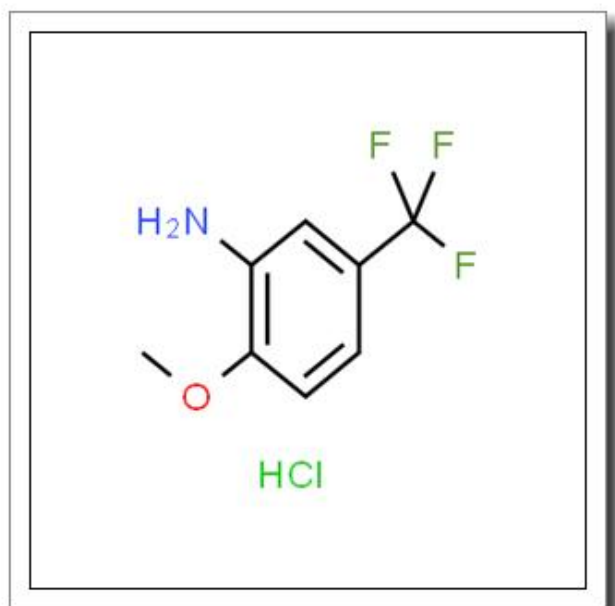


2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline hydrochloride (1:1)

2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline hydrochloride (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline hydrochloride (1:1)
中文名称	2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline hydrochloride (1:1)
CAS 号	254435-23-9
分子式	C ₈ H ₉ C ₁ F ₃ N ₀ O
分子量	227. 611
纯度	≥ 96%

产品说明

2-Methoxy-5-(trifluoromethyl)aniline hydrochloride (1:1) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-甲氧基-5-(三氟甲基)苯胺盐酸盐 (1:1)，CAS 号为 254435-23-9，分子式 $C_8H_9ClF_3NO$ ，分子量 227.611。其结构中同时含有甲氧基、三氟甲基及苯胺基团，赋予化合物独特的电子效应和空间位阻特性。盐酸盐形式显著提高了化合物的水溶性和稳定性，纯度 $\geq 96\%$ (HPLC 测定)，熔点为 185-189°C (分解)。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯胺衍生物，该化合物可通过氨基参与缩合反应，三氟甲基的强吸电子特性使其成为重要的有机合成中间体。其分子结构特别适合用于构建含氟药物分子骨架，在调节化合物脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性方面具有关键作用。在激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂的研发中显示出特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为抗肿瘤药物、抗抑郁药物及抗炎药物的关键中间体，特别用于含氟靶向药物的合成。
- (2) 材料科学：用于制备含氟液晶材料及光电功能材料。
- (3) 农药化学：作为新型杀虫剂和除草剂的合成前体。
- (4) 科研领域：用于有机氟化学机理研究及结构-活性关系分析。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存于 2-8°C 惰性气体环境中，开封后需充氮密封保存。使用时需在干燥箱中操作，避免接触水分和强氧化剂。溶解推荐使用无水乙醇或 DMF，水溶液需现配现用。长期储存建议每 12 个月进行纯度复检。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ 。安全

数据: 急性毒性 (大鼠经口) LD50 为 820mg/kg, 属于刺激性化学品。操作时需佩戴防护眼镜、防毒面具及丁腈手套, 避免吸入粉尘或接触皮肤。如发生接触, 立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品处置规范。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或家庭使用。具体应用前请查阅最新文献资料并开展小试实验。