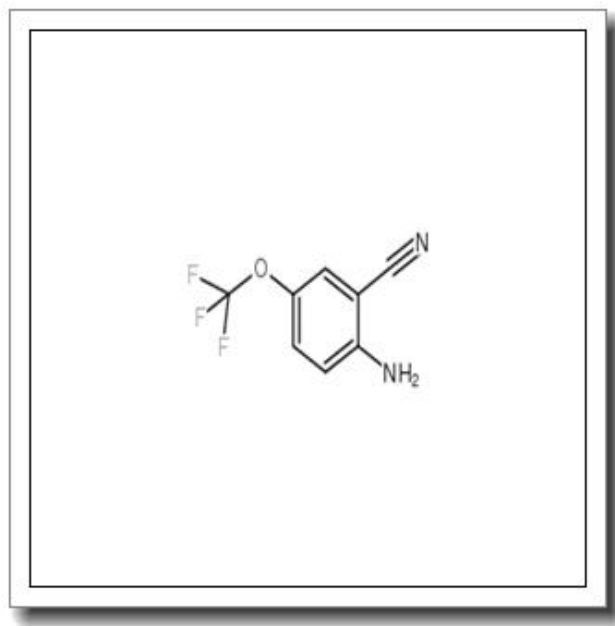


2-氨基-5-三氟甲氧基苯甲腈

2-amino-5-(trifluoromethoxy)benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-amino-5-(trifluoromethoxy)benzonitrile
中文名称	2-氨基-5-三氟甲氧基苯甲腈
CAS 号	549488-77-9
分子式	C ₈ H ₅ F ₃ N ₂ O
分子量	202.133
纯度	≥96%

产品说明

2-氨基-5-三氟甲氧基苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氨基-5-三氟甲氧基苯甲腈 (2-amino-5-(trifluoromethoxy)benzonitrile) 是一种含氟芳香族化合物, CAS 号为 549488-77-9, 分子式为 $C_8H_5F_3N_2O$, 分子量 202.133。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有苯环、氨基、三氟甲氧基和氰基的多功能结构特征。其独特的电子效应和空间位阻使其在有机合成中表现出高反应活性, 尤其是三氟甲氧基的强吸电子性可显著调节分子极性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可作为关键中间体用于构建含氟杂环结构, 其氨基和氰基可参与缩合、环化等反应, 三氟甲氧基则能增强代谢稳定性和脂溶性。在药物化学领域, 含三氟甲氧基的分子常表现出改善的血脑屏障穿透性和靶标结合亲和力, 因此本品在神经活性药物和抗感染剂研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药中间体合成, 具体包括: 1) 抗抑郁剂和抗癫痫药物的结构修饰; 2) 杀菌剂和杀虫剂的含氟活性片段构建; 3) 荧光标记物的前体合成。实验级产品适用于高通量筛选和构效关系研究, 工业级则用于规模化生产含三氟甲氧基的活性分子。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 避光干燥环境中, 长期储存需充惰性气体保护。开封后建议一次性使用完毕, 若需分次使用, 需在氮气环境下操作。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 水溶性较差, 配制溶液时建议超声辅助溶解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入粉尘。若接触皮肤, 立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵守当地危险化学品管理条例, 建议采用焚烧法降解。

(全文共计 436 字)