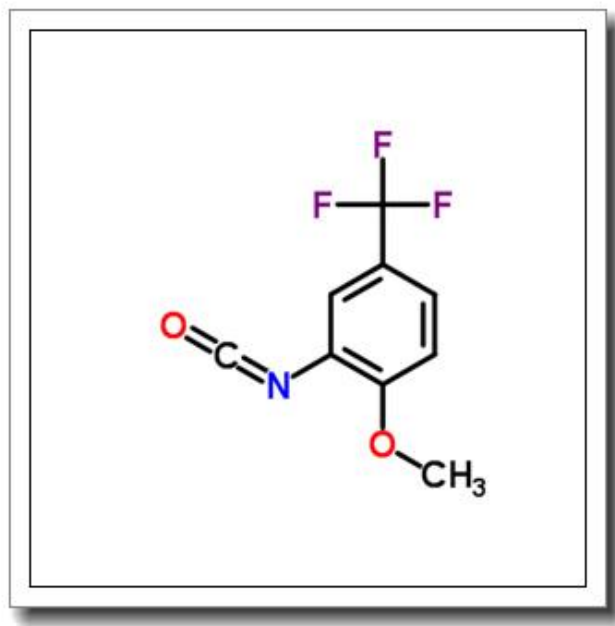


2-甲氧基-5-三氟甲基异氰酸苯酯

2-Methoxy-5-Trifluoromethylphenyl Isocyanate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methoxy-5-Trifluoromethylphenyl Isocyanate
中文名称	2-甲氧基-5-三氟甲基异氰酸苯酯
CAS 号	16588-75-3
分子式	C ₉ H ₆ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	217.145
纯度	≥96%

产品说明

2-甲氧基-5-三氟甲基异氰酸苯酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-甲氧基-5-三氟甲基异氰酸苯酯 (2-Methoxy-5-Trifluoromethylphenyl Isocyanate) 是一种含氟芳香族异氰酸酯化合物，化学式为 $C_9H_6F_3NO_2$ ，分子量 217.145，CAS 号为 16588-75-3。本品为无色至淡黄色液体，纯度 $\geq 96\%$ ，具有典型的异氰酸酯特征性气味。其分子结构中的甲氧基 (-OCH₃) 和三氟甲基 (-CF₃) 赋予其独特的电子效应与空间位阻，显著影响其反应活性和溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为异氰酸酯类化合物，该产品可通过 -NCO 基团与氨基、羟基等亲核基团发生加成反应，形成稳定的脲键或氨基甲酸酯结构。三氟甲基的强吸电子效应可调节反应速率，使其在温和条件下仍保持较高活性。此类特性使其成为合成含氟功能材料的核心中间体，尤其在药物化学中用于构建靶向分子骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药、农药及特种材料领域。在医药研发中，用于合成抗肿瘤、抗病毒药物的含氟活性片段；在农药领域，可作为杀虫剂或除草剂的增效修饰基团；在高分子材料中，参与制备耐候性聚氨酯或光学树脂。具体用途包括但不限于：蛋白质交联试剂、手性催化剂配体、液晶材料单体等。

4. 储存条件与使用建议

需严格隔绝湿气与空气，密封保存于干燥惰性气体（如氮气）保护的容器中，推荐储存温度为 2-8℃。使用时应于通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入蒸气。开封后建议一次性用完，若需分次使用，需对剩余试剂进行脱气处理（如分子筛除水）后重新充氮密封。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度，批次报告包含水分含量 ($\leq 0.1\%$)、游离酸值等关键参数。安全警示：异氰酸酯类化合物具有强刺激性，可能引发呼吸道及皮肤过敏反应。

应。操作时需佩戴防毒面具、丁基手套及护目镜，若意外接触需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵循当地法规，禁止直接排入下水道。

（注：本说明基于当前科学认知编制，具体应用需结合实验条件优化。技术参数更新恕不另行通知。）