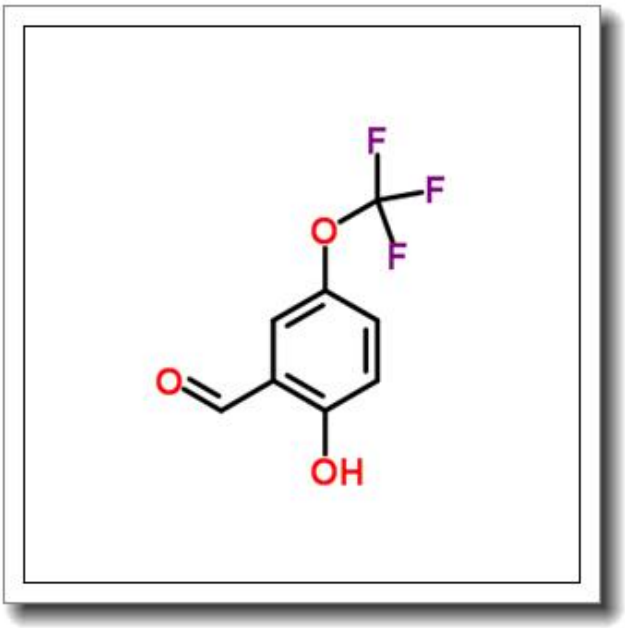
2-羟基-5-(三氟甲氧基)苯甲醛

2-Hydroxy-5-(trifluoromethoxy)benzaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Hydroxy-5-(trifluoromethoxy)benzaldehyde
中文名称	2-羟基-5-(三氟甲氧基)苯甲醛
CAS 号	93249-62-8
分子式	C8H5F3O3
分子量	206.119
纯度	≧96%

产品说明

2-羟基-5-(三氟甲氧基)苯甲醛产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-羟基-5-(三氟甲氧基)苯甲醛（化学名称：2-Hydroxy-5-(trifluoromethoxy)benzaldehyde）是一种含氟芳香族化合物，CAS 号为 93249-62-8，分子式为 C8H5F3O3，分子量为 206.119。本品为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度≥96%，具有苯甲醛特有的醛基活性，同时羟基和三氟甲氧基的引入赋予其独特的电子效应和空间位阻特性，使其在有机合成中表现出高反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其三氟甲氧基的强吸电子性和羟基的配位能力，常作为关键中间体用于构建含氟药物分子或功能材料。在生物活性分子设计中，三氟甲氧基可显著改善化合物的脂溶性和代谢稳定性，而醛基则为后续衍生化（如缩合、还原胺化）提供活性位点，广泛应用于抗炎、抗肿瘤等药物研发领域。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药中间体：用于合成含氟非甾体抗炎药（如 COX-2 抑制剂）及抗抑郁药物。

3.2 材料科学：作为液晶材料或有机光电材料的修饰基团，提升材料的热稳定性和介电性能。

3.3 农药化学：参与构建高效低毒含氟农药分子，如杀虫剂和除草剂的活性组分。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭避光容器中，置于阴凉干燥处（建议温度 2-8℃），避免与强氧化剂、强酸强碱接触。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。因醛基易被氧化，建议开封后充氮保护并尽快使用。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为大鼠经口>2000 mg/kg，但仍可能引起皮肤刺激和眼部损伤。操作时应

遵循 GHS 分类：H315（造成皮肤刺激）、H319（造成严重眼刺激），应急处理需用大量清水冲洗接触部位，并就医检查。废弃物处置需符合当地环保法规。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺验证。更多技术参数可索取 COA 报告。