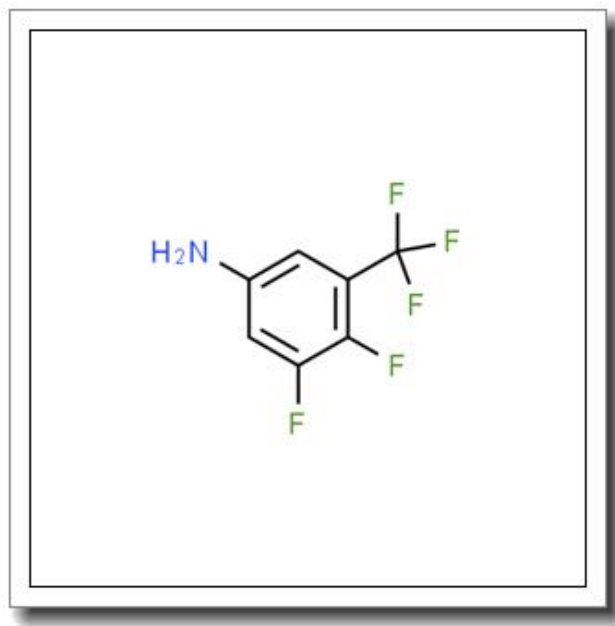


3,4-二氟-5-(三氟甲基)苯胺

3,4-Difluoro-5-(trifluoromethyl)aniline



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,4-Difluoro-5-(trifluoromethyl)aniline
中文名称	3,4-二氟-5-(三氟甲基)苯胺
CAS 号	1803790-37-5
分子式	C7H4F5N
分子量	197.11
纯度	≥96%

产品说明

3,4-二氟-5-(三氟甲基)苯胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3,4-二氟-5-(三氟甲基)苯胺 (CAS 号: 1803790-37-5) 是一种含氟芳香胺类化合物, 分子式为 $C_7H_4F_5N$, 分子量 197.11。其结构特征为苯环上带有二氟取代基和三氟甲基取代基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻。该化合物常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 纯度 $\geq 96\%$, 具有较高的化学稳定性和反应活性, 尤其适用于亲核取代和偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香胺衍生物, 该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。氟原子的引入可显著改善分子的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性, 使其成为药物分子设计中的关键中间体。其胺基团可作为活性位点参与酰胺化、重氮化等反应, 广泛应用于靶向药物和农药活性成分的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药、农药及功能材料领域。在医药研发中, 常用于构建抗肿瘤、抗病毒药物的含氟芳环结构; 在农药领域, 可作为杀菌剂或除草剂的增效修饰基团; 在材料科学中, 用于合成含氟液晶单体或高性能聚合物。典型应用包括 Suzuki 偶联反应、Buchwald-Hartwig 胺化反应等交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

需避光密封保存于 -20°C 至 4°C 的惰性气体 (如氮气) 环境中, 长期储存建议添加抗氧化剂。开封后应在干燥条件下尽快使用, 避免接触水分或强氧化剂。实验操作需在通风橱中进行, 建议佩戴耐氟化学品手套和护目镜。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性低。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 确保杂质含量 $< 4\%$ 。该化合物对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性, CAS 风险代码为 H302-H315-H319-H335, 需参照 GHS 标

准标注警示标识。泄漏处理应使用惰性吸附材料，废弃物按危险化学品规范处置。
提供 MSDS 证书及 COA 分析报告，运输分类为 UN2810 6.1 类危险品。