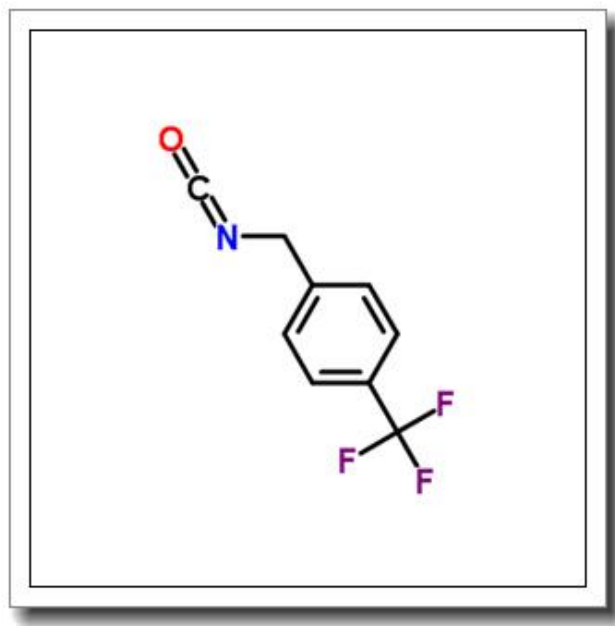


4-三氟甲基苄基异腈酸酯

1-(isocyanatomethyl)-4-(trifluoromethyl)benzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(isocyanatomethyl)-4-(trifluoromethyl)benzene
中文名称	4-三氟甲基苄基异腈酸酯
CAS 号	102422-55-9
分子式	C ₉ H ₆ F ₃ N ₁ O
分子量	201.145
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-三氟甲基苄基异腈酸酯 (1-(isocyanatomethyl)-4-(trifluoromethyl)benzene) 是一种有机化合物, CAS 号为 102422-55-9, 分子式为 $C_9H_6F_3NO$, 分子量为 201.145。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有异腈酸酯基团 (-NCO) 和三氟甲基 (-CF₃) 的独特结构, 赋予其高反应活性和疏水性。其纯度通常 $\geq 96\%$, 适合用于精细化学合成和生物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

4-三氟甲基苄基异腈酸酯在生物化学领域主要用于作为交联剂或中间体参与反应。异腈酸酯基团能与氨基、羟基等亲核基团反应, 形成稳定的共价键, 适用于蛋白质修饰、聚合物合成以及小分子偶联。三氟甲基的引入可增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物设计和材料科学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它可用于构建含三氟甲基的药物分子, 提高药物的生物利用度; 在农药领域, 作为中间体合成高效杀虫剂或除草剂; 在材料科学中, 用于制备高性能聚氨酯或特种涂料。此外, 它还常用于荧光标记和生物探针的合成。

4. 储存条件与使用建议

4-三氟甲基苄基异腈酸酯需密封保存于干燥、阴凉处, 避免与湿气接触。推荐储存温度为 2-8°C, 短期使用可置于室温, 但需确保容器密闭。使用时应在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与水分或醇类接触。实验人员需佩戴防护手套、护目镜和防毒面具, 并在通风橱中操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。其安全信息需特别注意: 该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 可能引起过敏反应。若不慎接触, 应立即用

大量清水冲洗并就医。运输和处置需符合化学品管理法规，避免与强氧化剂或酸类物质混合。

以上内容为专业化学品说明，供研究人员和工业用户参考。具体应用前请查阅相关文献并评估实验风险。