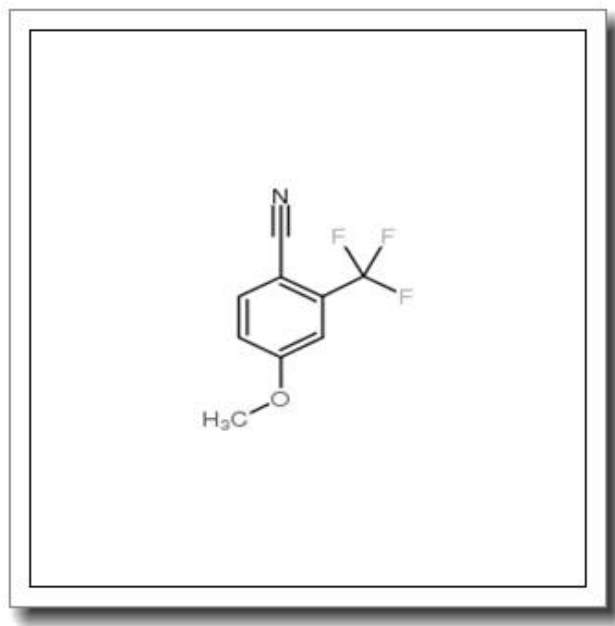


# 4-甲氧基-2-三氟甲基苯甲腈

*4-methoxy-2-(trifluoromethyl)benzonitrile*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | 4-methoxy-2-(trifluoromethyl)benzonitrile                     |
| 中文名称  | 4-甲氧基-2-三氟甲基苯甲腈   |
| CAS 号 | 875664-48-5   |
| 分子式   | C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> F <sub>3</sub> N <sub>1</sub> O |
| 分子量   | 201.145   |
| 纯度    | ≥96%  |

## 产品说明

### 4-甲氧基-2-三氟甲基苯甲腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-甲氧基-2-三氟甲基苯甲腈 (CAS 号: 875664-48-5) 是一种含氟芳香族化合物, 分子式为  $C_9H_6F_3NO$ , 分子量 201.145。该物质为白色至类白色结晶性粉末, 具有特征性芳香气味, 常温下稳定。其结构中甲氧基与三氟甲基的协同效应赋予分子独特的电子分布特性, 使其在极性有机溶剂 (如甲醇、乙腈) 中具有良好的溶解性, 而在水中溶解度较低。产品纯度  $\geq 96\%$ , 可通过 HPLC 和 NMR 进行验证。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲腈衍生物, 该化合物因其三氟甲基的强吸电子性和甲氧基的空间位阻效应, 在药物化学中常作为关键中间体。其氰基可参与缩合、环化等反应, 三氟甲基能增强代谢稳定性, 使其在蛋白酶抑制剂和受体拮抗剂设计中具有特殊价值。该结构单元对调节化合物的脂溶性和生物膜穿透性有显著影响。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发领域, 特别是在抗肿瘤和中枢神经系统药物开发中用作核心骨架。具体用途包括: 1) 作为激酶抑制剂合成的砌块; 2) 用于构建 PET 显影剂的放射性标记前体; 3) 在农药化学中开发新型杀虫剂; 4) 作为液晶材料的改性单体。建议使用量级为毫克至克级, 反应条件需避光惰性气体保护。

#### 4. 储存条件与使用建议

长期储存应置于  $-20^{\circ}C$ 、充氮气密封的棕色玻璃瓶中, 短期使用可存放于  $2-8^{\circ}C$  干燥器。开封后建议在手套箱中分装, 避免吸湿。溶解时优先选用无水 DMSO 或 DMF, 配制溶液需现配现用。操作时应佩戴化学防护眼镜和丁腈手套, 通风橱中进行称量。

#### 5. 质量控制与安全信息

本批次产品经 GC-MS 检测纯度  $\geq 96\%$ , 重金属含量  $< 10ppm$ , 水分含量  $\leq 0.5\%$ 。安全数据: 急性毒性 (口服, 大鼠)  $LD_{50} > 2000mg/kg$ , 皮肤刺激性类别 3。意外接触眼

睛时需立即用生理盐水冲洗 15 分钟。废弃物处理应遵守当地危险化学品处置法规，不可直接排入下水系统。完整安全技术说明书（MSDS）可随货提供。