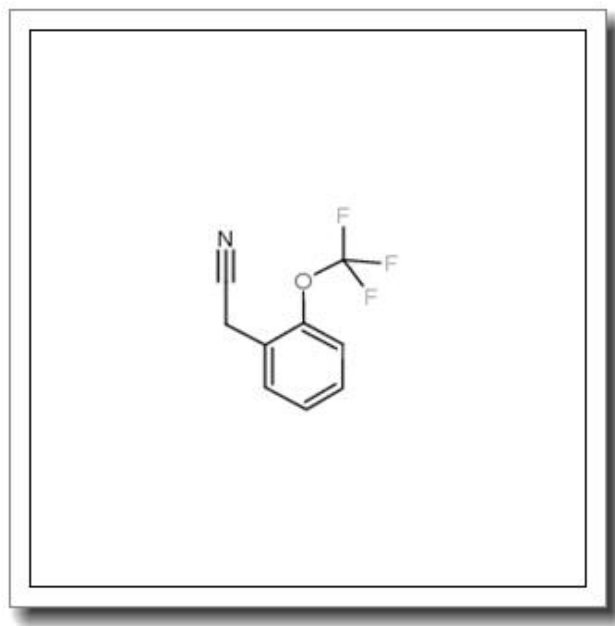


邻三氟甲氧基苯乙腈

2-Triflnoromethoxybenzyl cyanide



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 2-Triflnoromethoxybenzyl cyanide |
| 中文名称 | 邻三氟甲氧基苯乙腈 |
| CAS 号 | 137218-25-8 |
| 分子式 | C ₉ H ₆ F ₃ N ₁ O |
| 分子量 | 201.145 |
| 纯度 | ≥ 96% |

产品说明

2-三氟甲氧基苯乙腈产品说明书

产品概述与化学特性

2-三氟甲氧基苯乙腈 (2-Trifluoromethoxybenzyl cyanide, CAS 号 137218-25-8) 是一种含氟有机化合物, 分子式为 $C_9H_6F_3NO$, 分子量 201.145。本品为无色至淡黄色液体或结晶, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中三氟甲氧基 (-OCF₃) 与氰基 (-CN) 的协同作用, 使其成为有机合成中的重要中间体。

生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域表现出独特的电子效应和空间位阻特性。三氟甲氧基的强吸电子性可显著调节分子极性, 而氰基则提供了进一步官能团转化的可能性。这种结构特点使其在药物分子设计中具有重要价值, 尤其适用于构建含氟杂环或作为酶抑制剂的药效团片段。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成抗抑郁、抗炎及抗肿瘤药物的含氟活性成分。
2. 农药化学: 作为新型杀虫剂或除草剂的关键结构单元。
3. 材料科学: 参与制备含氟液晶材料或特种高分子单体。
4. 科研用途: 在有机氟化学研究中作为标准试剂或反应底物。

储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于阴凉干燥处 (建议温度 2-8°C), 避免光照和湿气。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。本品易吸潮水解, 开封后建议充氮保存。与强氧化剂、强酸强碱需隔离存放。

质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 双重检测确保纯度 $\geq 96\%$, 批次间稳定性控制在 $\pm 1\%$ 。安全数据: LD₅₀ (大鼠经口) > 500 mg/kg, 属于刺激性化学品。接触皮肤后立即用大量清水冲

洗 15 分钟，如误入眼睛需用生理盐水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定。

本产品仅限科研及工业用途，不适用于直接药用或食品添加。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验。