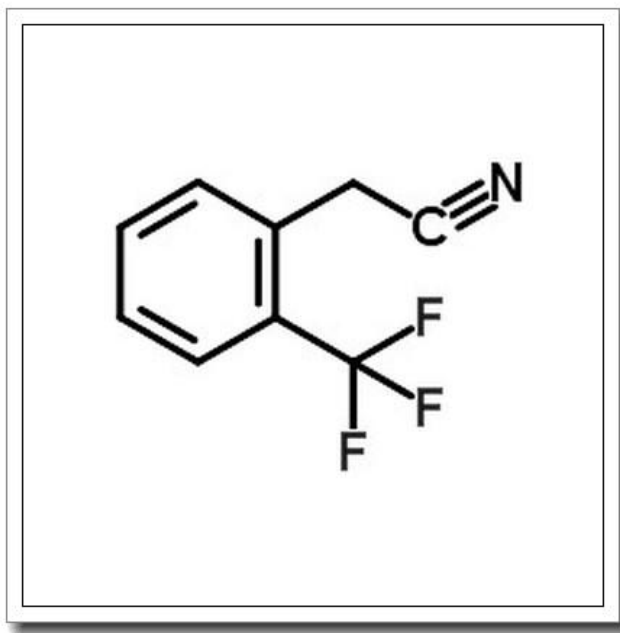


2-(三氟甲基)苯基乙腈

2-[2-(trifluoromethyl)phenyl]acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[2-(trifluoromethyl)phenyl]acetonitrile
中文名称	2-(三氟甲基)苯基乙腈
CAS 号	3038-47-9
分子式	C ₉ H ₆ F ₃ N
分子量	185.146
纯度	>96%

产品说明

2-[2-(三氟甲基)苯基]乙腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-[2-(三氟甲基)苯基]乙腈（化学名称：2-[2-(trifluoromethyl)phenyl]acetonitrile）是一种含氟芳香族腈类化合物，CAS 号为 3038-47-9，分子式为 C₉H₆F₃N，分子量为 185.146。该化合物常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体，具有典型的腈类特征气味。其结构中三氟甲基的强吸电子效应与苯环共轭体系相结合，赋予其独特的化学稳定性和反应活性。产品纯度经高效液相色谱（HPLC）检测确认 ≥96%，适用于高精度合成需求。

2. 生物化学功能与重要性

作为有机合成中间体，该化合物中的氰基（-CN）可作为亲核位点参与缩合、环化等反应，而三氟甲基（-CF₃）则能显著调节分子脂溶性和代谢稳定性。在药物化学领域，三氟甲基芳烃结构是设计抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的重要药效团，其衍生物常表现出优异的生物活性和药代动力学特性。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：

- 3.1 医药中间体：用于合成含三氟甲基结构的非甾体抗炎药（NSAIDs）及抗抑郁药物关键片段。
- 3.2 农药开发：作为新型杀虫剂和杀菌剂的苯环修饰前体。
- 3.3 材料科学：参与制备液晶材料单体及含氟高分子聚合物的功能化改性。
- 3.4 科研用途：在有机氟化学研究中作为标准参照物或反应底物。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：需密封保存于阴凉干燥处，推荐温度 2-8℃，避光防潮。长期储存建议充入惰性气体保护。
- 4.2 使用建议：操作时佩戴防化手套、护目镜及防毒面具，应在通风橱中进行称量与反应。溶解性测试表明易溶于乙醚、二氯甲烷等有机溶剂，微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：批次产品均通过核磁共振（ ^1H NMR）、质谱（MS）及气相色谱（GC）三重验证。

5.2 安全警示：本品对眼睛和皮肤有刺激性，UN 编号暂未归类，但建议按危险化学品管理。若接触皮肤应立即用大量清水冲洗 15 分钟，就医处理。废弃物处置需符合当地环保法规，禁止直接排入下水道。

（全文共计 498 字）