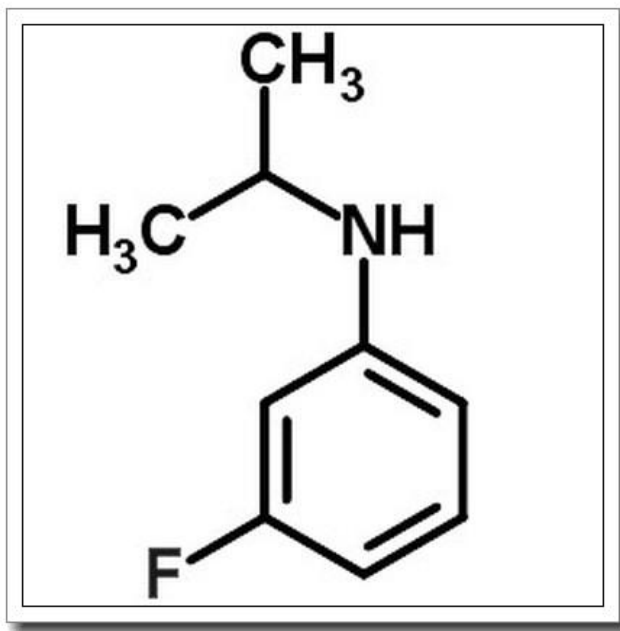


3-氟-N-异丙苯胺

N-Isopropyl-3-fluoroaniline



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-Isopropyl-3-fluoroaniline
中文名称	3-氟-N-异丙苯胺
CAS 号	121431-27-4
分子式	C ₉ H ₁₂ FN
分子量	153.197
纯度	>96%

产品说明

N-Isopropyl-3-fluoroaniline (3-氟-N-异丙苯胺) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为无色至淡黄色透明液体，化学名称为 N-Isopropyl-3-fluoroaniline，CAS 号 121431-27-4，分子式 C₉H₁₂FN，分子量 153.197。纯度 ≥96%，密度约 1.05 g/cm³ (25° C)，沸点 220-222° C，闪点 >100° C。结构中含氟原子与异丙胺基团，赋予其独特的亲脂性和电子效应，易溶于有机溶剂如乙醇、乙醚和丙酮，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳香胺衍生物，其氟取代基可增强分子稳定性及生物活性，而异丙胺基团提供空间位阻效应，使其成为药物化学中关键的中间体。在酶抑制和受体结合研究中，该化合物可通过修饰电子云分布影响靶点相互作用，尤其适用于设计中枢神经系统 (CNS) 药物或抗肿瘤剂。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发与有机合成领域。具体用途包括：

- 合成氟代苯胺类抗抑郁药或抗精神病药物的前体
- 用于构建含氟杂环化合物，如三唑类、喹啉类衍生物
- 作为荧光标记物或探针的修饰基团
- 农药中间体开发中用于引入氟原子以提高活性

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8° C。长期保存需充氮气保护。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入蒸气。建议佩戴丁腈手套、护目镜及防毒面具。若需稀释，优先选择惰性溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度，批次间差异 <1%。产品含微量水分 (≤0.5%)，需避免与强氧化剂 (如过硫酸盐) 接触。安全数据：LD₅₀ (大鼠经口) 约 1200 mg/kg，属于刺

激性物质（GHS 分类：Skin Irrit. 2）。泄漏处理时需用吸附棉覆盖，按危险废弃物处置。

（注：本说明基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新材料安全数据表 MSDS。）