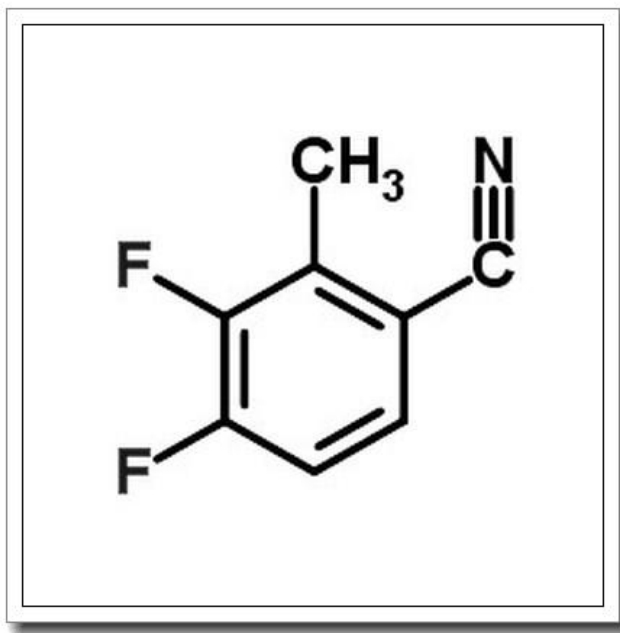


3,4-二氟-2-甲基苯腈

3,4-Difluoro-2-methylbenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,4-Difluoro-2-methylbenzonitrile
中文名称	3,4-二氟-2-甲基苯腈
CAS 号	847502-83-4
分子式	C ₈ H ₅ F ₂ N
分子量	153.129
纯度	>96%

产品说明

3,4-二氟-2-甲基苯腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3,4-二氟-2-甲基苯腈 (CAS 号: 847502-83-4) 是一种含氟芳香族腈类化合物, 分子式为 $C_8H_5F_2N$, 分子量为 153.129。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 具有显著的化学稳定性和疏水性。其结构中的氟原子和腈基赋予其独特的电子效应和反应活性, 使其成为有机合成和药物化学中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族化合物, 3,4-二氟-2-甲基苯腈在生物活性分子设计中具有重要作用。氟原子的引入可增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 而腈基则为其进一步衍生化提供了反应位点。该化合物常用于构建具有生物活性的杂环结构或作为药物分子的关键片段, 尤其在抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物研发中表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

3,4-二氟-2-甲基苯腈广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成酪氨酸激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂的重要前体; 在农药化学中, 可用于制备高效含氟杀虫剂或除草剂; 在材料科学中, 可作为液晶材料或高分子单体的修饰基团。此外, 该化合物还可用于放射性标记和荧光探针的合成。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉处, 推荐储存温度为 2-8°C, 避免光照和潮湿环境。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在通风橱中操作。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和丙酮, 微溶于水, 实际操作中需选择合适的有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间质量稳定。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不慎吸入或接触, 应立即用大量清

水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，建议采用专业化学废弃物回收方式。更多技术参数和安全信息请参阅随附的MSDS（物质安全数据表）。