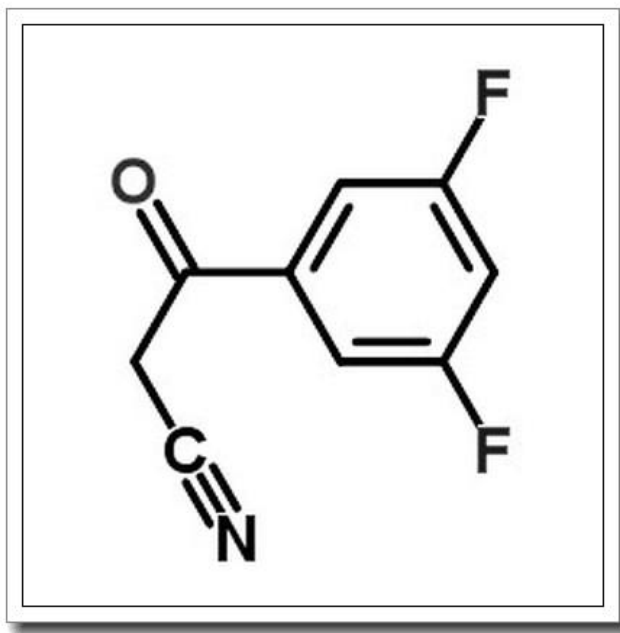


3,5-二氟苯甲酰基乙氰

3-(3,5-difluorophenyl)-3-oxopropanenitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(3,5-difluorophenyl)-3-oxopropanenitrile
中文名称	3,5-二氟苯甲酰基乙氰
CAS 号	842140-51-6
分子式	C ₉ H ₅ F ₂ N ₀
分子量	181.139
纯度	>96%

产品说明

3-(3,5-二氟苯基)-3-氧代丙腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 3-(3,5-difluorophenyl)-3-oxopropanenitrile, 中文别名 3,5-二氟苯甲酰基乙腈, CAS 号 842140-51-6, 分子式 C₉H₅F₂N₀, 分子量 181.139。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%。该化合物结构中含二氟苯基、羰基及氰基官能团, 具有显著的电子效应和反应活性, 易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族 β-酮腈衍生物, 其氟原子赋予分子高脂溶性和代谢稳定性, 而氰基与酮基可作为关键药效团参与亲核加成或环化反应。该类结构常见于药物分子设计中, 能通过抑制特定酶活性或干扰细胞信号通路发挥生物效应, 尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物研发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体合成, 尤其适用于构建含氟杂环化合物。具体用途包括:

- 作为 EGFR 抑制剂类抗癌药物的关键前体
- 用于合成 α, β-不饱和酮类化合物, 拓展结构多样性库
- 在荧光探针开发中作为氟标记模块

实验室研究中需严格控制反应条件, 避免氰基水解。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃密封避光环境, 惰性气体保护下可延长稳定性。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防毒面具及丁腈手套。溶解建议优先选用无水 DMSO, 配制后溶液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度, 批次间 RSD <1%。MS 和 NMR 确保结构准确性。本品属有害化

学品，吸入或皮肤接触可能引起中毒，应急处理需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为危险有机氟化物处置，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用请结合具体实验方案调整。）