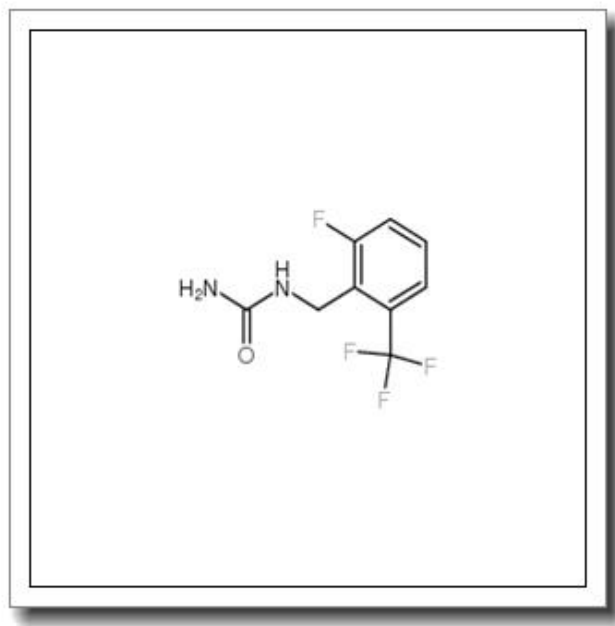


# 1-(2-氟-6-(三氟甲基)苄基)脲

*[2-fluoro-6-(trifluoromethyl)phenyl]methylurea*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	[2-fluoro-6-(trifluoromethyl)phenyl]methylurea
中文名称	1-(2-氟-6-(三氟甲基)苄基)脲
CAS 号	830346-46-8
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> F <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O
分子量	236.166
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1-(2-氟-6-(三氟甲基)苄基)脲产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为[2-fluoro-6-(trifluoromethyl)phenyl]methylurea, CAS 号为 830346-46-8, 分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>F<sub>4</sub>N<sub>2</sub>O, 分子量 236.166。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 具有显著的含氟芳香族结构特征。其分子结构中同时包含氟原子和脲基团, 赋予其独特的电子效应和氢键形成能力, 在有机合成与药物化学中具有重要价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟脲类衍生物, 该化合物可通过脲基团与生物靶标形成特异性氢键相互作用, 而三氟甲基的强吸电子效应能显著调节分子脂溶性和代谢稳定性。这类结构常见于酶抑制剂设计, 尤其在激酶抑制剂和 GPCR 调节剂开发中表现出潜在活性, 是药物先导化合物优化的关键中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 具体包括: 1) 作为小分子药物候选化合物的核心骨架, 用于抗肿瘤、抗炎药物开发; 2) 在农药化学中用于新型杀虫剂/杀菌剂的结构修饰; 3) 作为荧光探针或标记物的前体材料。实验室级产品适用于高通量筛选、结构-活性关系研究等科研场景。

#### 4. 储存条件与使用建议

需密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中, 避免光照及潮湿。开封后建议充氮保护, 长期储存需置于惰性气体氛围。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试显示其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较低, 建议先用有机溶剂预溶后再进行缓冲液稀释。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明该物质可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时需遵守 GHS 分类要求 (危险类别: 刺激性

物质)。废弃物处置应参照当地化学品管理法规, 不可直接排入下水系统。详细毒理学数据可索取材料安全数据表 (MSDS)。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。使用者应具备专业化学品操作资质。