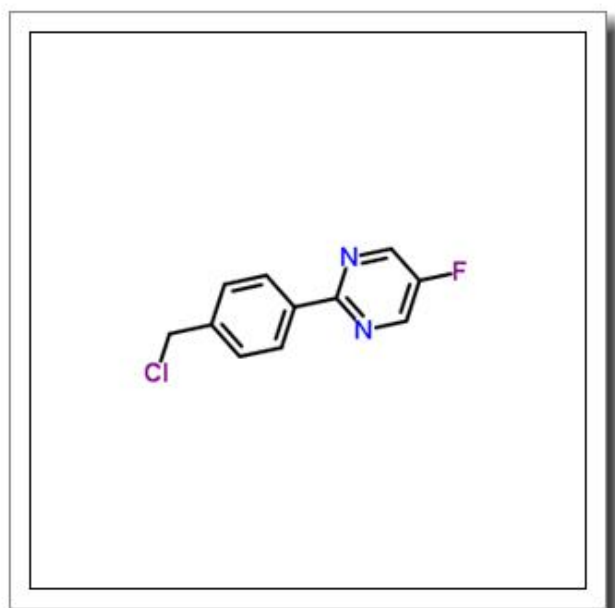


2-[4-(Chloromethyl)phenyl]-5-fluoropyrimidine

2-[4-(Chloromethyl)phenyl]-5-fluoropyrimidine



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 2-[4-(Chloromethyl)phenyl]-5-fluoropyrimidine |
| 中文名称 | 2-[4-(Chloromethyl)phenyl]-5-fluoropyrimidine |
| CAS 号 | 1139432-30-6 |
| 分子式 | C ₁₁ H ₈ ClFN ₂ |
| 分子量 | 222.646 |
| 纯度 | ≥ 96% |

产品说明

2-[4-(氯甲基)苯基]-5-氟嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 2-[4-(氯甲基)苯基]-5-氟嘧啶 (2-[4-(Chloromethyl)phenyl]-5-fluoropyrimidine)，CAS 号 1139432-30-6，分子式 C₁₁H₈ClFN₂，分子量 222.646。其结构中包含嘧啶环与苯环的共轭体系，氯甲基与氟原子的引入赋予其高反应活性。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，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

该化合物作为嘧啶类衍生物，可通过氯甲基位点进行亲核取代反应，或通过嘧啶环参与氢键相互作用，在药物化学中常用于构建靶向分子骨架。5-位氟原子的引入可增强其与生物靶点的结合能力，尤其在激酶抑制剂和抗肿瘤先导化合物开发中具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成，特别是用于制备 EGFR 抑制剂、CDK 抑制剂等小分子抗肿瘤药物。在材料科学中，可作为有机发光二极管 (OLED) 的前体材料。实验室研究中常用于：

- 构建 DNA/RNA 类似物
- 开发新型抗菌剂或抗病毒剂
- 修饰高分子聚合物以增强功能特性

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃至 4℃的密闭容器中，避光防潮，惰性气体（如氮气）保护可延长稳定性。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，佩戴防化手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，工作浓度需通过预实验优化。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度经 HPLC、NMR 双重验证，残留溶剂符合 ICH 标准。急性毒性数据 (LD₅₀)

大鼠口服) 为 820 mg/kg, 属于有害物质 (GHS 分类: H302)。避免吸入粉尘或接触皮肤, 如意外暴露需用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵循当地危险化学品法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 具体应用需结合实验条件验证。)