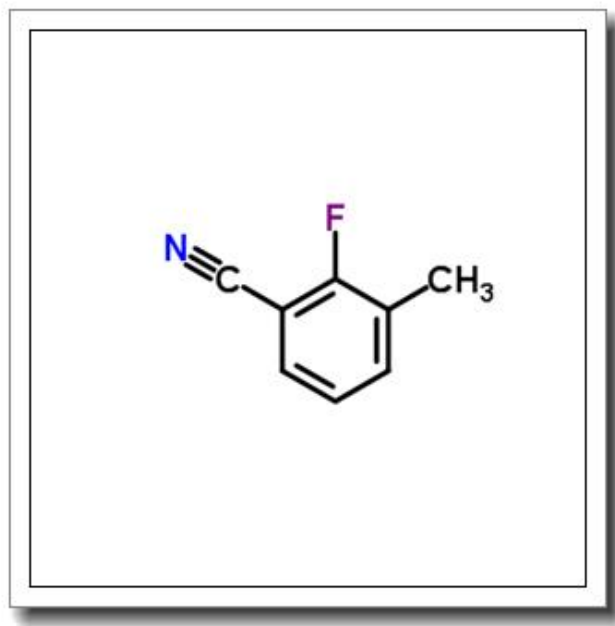


2-氟-3-甲基苯腈

2-Fluoro-3-methylBenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Fluoro-3-methylBenzonitrile
中文名称	2-氟-3-甲基苯腈
CAS 号	185147-07-3
分子式	C ₈ H ₆ FN
分子量	135.138
纯度	≥ 96%

产品说明

2-氟-3-甲基苯腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氟-3-甲基苯腈 (2-Fluoro-3-methylbenzotrile) 是一种含氟芳香族化合物, 化学式为 C_8H_6FN , 分子量为 135.138, CAS 号为 185147-07-3。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有苯环上氟原子和氰基的独特电子效应, 使其在有机合成中表现出高反应活性。其熔点和沸点数据需参考具体实验条件, 建议在干燥惰性气体环境下保存以避免水解。

2. 生物化学功能与重要性

作为氟代苯衍生物, 2-氟-3-甲基苯腈的氰基和氟原子可参与亲核取代、偶联反应等关键步骤, 是构建药物活性分子的重要中间体。氟原子的引入能显著改善化合物的脂溶性和代谢稳定性, 在药物设计中常用于优化先导化合物的生物利用度。其在酶抑制剂和受体配体开发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和农药中间体合成, 特别适用于抗肿瘤、抗感染类药物的研发。在材料科学领域, 可作为液晶材料或高分子单体的修饰基团。具体用途包括但不限于:

- 用于 Suzuki 偶联反应制备联芳基化合物
- 作为含氟杂环化合物的前体
- 在放射性标记示踪剂合成中的应用

4. 储存条件与使用建议

建议储存于密闭容器中, 置于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 干燥避光环境, 惰性气体保护可延长保存期限。使用前需恢复至室温并避免接触水分。操作时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中进行称量。溶解性测试表明易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。安全数据表明其具有刺激性，可能引起皮肤和眼睛损伤，CAS 号 185147-07-3 对应的 GHS 分类为：

H302 吞咽有害

H315 造成皮肤刺激

H319 造成严重眼刺激

建议急救措施包括立即用大量清水冲洗接触部位，吸入时转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

（注：实际应用中请以最新版物质安全数据表 MSDS 为准）