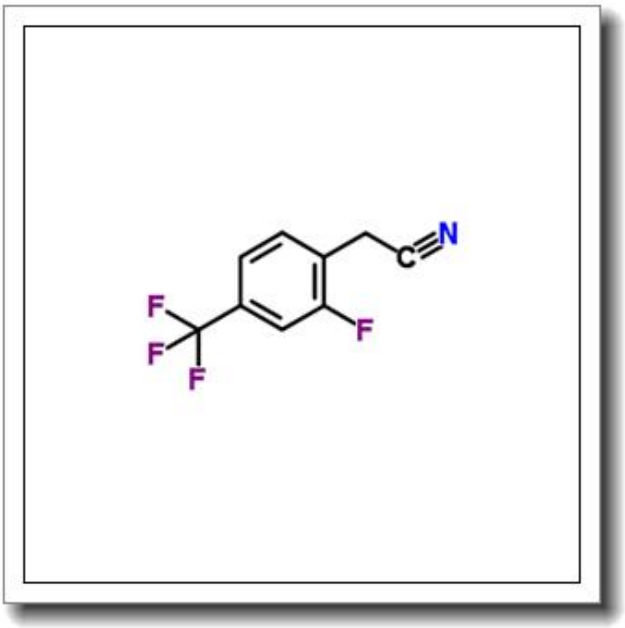
2-氟-4-三氟甲基苯乙腈

2-[2-fluoro-4-(trifluoromethyl)phenyl]acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[2-fluoro-4-(trifluoromethyl)phenyl]acetonitrile
中文名称	2-氟-4-三氟甲基苯乙腈
CAS 号	239087-11-7
分子式	C9H5F4N
分子量	203.136
纯度	≧96%

产品说明

2-[2-氟-4-(三氟甲基)苯基]乙腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为含氟芳香族乙腈衍生物，化学名称为2-[2-fluoro-4-(trifluoromethyl)phenyl]acetonitrile（CAS 239087-11-7），分子式C9H5F4N，分子量203.136。外观为无色至淡黄色透明液体或结晶，纯度≥96%。其结构中的氟原子与三氟甲基赋予分子强电负性和脂溶性，苯环与氰基的共轭体系使其具有独特的反应活性。该化合物在极性有机溶剂（如DMF、乙腈）中溶解性良好，需避光保存以防光解。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟苯乙腈类化合物，该分子可通过氰基参与亲核加成反应，同时苯环上的氟原子可作为氢键受体，增强与生物靶标的相互作用。三氟甲基的引入显著提高其代谢稳定性和细胞膜穿透能力，使其在药物化学中成为优化先导化合物的重要砌块，尤其在抗肿瘤、抗炎靶点抑制剂设计中具有应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药中间体：用于合成含氟酪氨酸激酶抑制剂或G蛋白偶联受体调节剂。

3.2 农药开发：作为高效杀虫剂/除草剂的氟代芳环结构单元。

3.3 材料科学：参与制备含氟液晶材料或光电功能分子。

3.4 科研用途：在氟化学机理研究或同位素标记实验中作为示踪分子。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃至4℃惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，避免与强氧化剂、酸碱共存。开封后建议分装使用，剩余物料需充氮密封。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防化手套及护目镜。溶解时优先选用干燥THF或二氯甲烷，反应温度建议控制在0-25℃以保持稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经HPLC归一化法检测纯度，批号关联GC-MS及1H NMR谱图数据。危险类别

为 H302（吞咽有害）、H315（皮肤刺激），应急处理需用大量清水冲洗接触部位。运输按 UN2810 标准包装，MSDS 备索。废弃物处置应遵循属地法规，建议通过专业危废机构处理。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验验证。产品规格可能因批次调整，请以随货 COA 为准。