

3-氟-2-三氟甲基苯甲腈

3-fluoro-2-(trifluoromethyl)benzotrile

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	3-fluoro-2-(trifluoromethyl)benzotrile
中文名称	3-氟-2-三氟甲基苯甲腈
CAS 号	261951-81-9
分子式	C ₈ H ₃ F ₄ N
分子量	189.11
纯度	≥ 96%

产品说明

3-氟-2-三氟甲基苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氟-2-三氟甲基苯甲腈（英文名称：3-fluoro-2-(trifluoromethyl)benzotrile）是一种含氟芳香族化合物，CAS 号为 261951-81-9，分子式 $C_8H_3F_4N$ ，分子量 189.11。该化合物为无色至淡黄色液体或结晶固体，纯度 $\geq 96\%$ ，具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中苯环上的氟原子和三氟甲基基团赋予其独特的电子效应和空间位阻，使其在有机合成中表现出优异的反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟有机中间体，该化合物在药物化学和材料科学领域具有重要价值。氟原子的引入可显著改善分子的脂溶性、代谢稳定性和生物利用度，因此在抗癌、抗病毒及中枢神经系统药物研发中常作为关键砌块。三氟甲基的强吸电子特性进一步增强了其与生物靶点的相互作用能力，为药物设计提供了更多可能性。

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的合成，具体包括：

- 作为含氟药物（如 JAK 抑制剂、HIV 蛋白酶抑制剂）的核心结构单元
- 用于构建液晶材料、高分子聚合物的功能性单体
- 在农用化学品中作为高效杀虫剂或除草剂的修饰基团
- 在有机催化反应中作为配体或底物参与 C-F 键活化反应

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存，长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于乙醚、二氯甲烷等有机溶剂，水溶性较低，建议预先用 DMF 或 THF 助溶。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 GC-MS 双重检测，确保杂质含量符合标准。MSDS 数据显示其属于刺激性化学品，皮肤接触可能引起红肿，吸入蒸气会导致呼吸道刺激。应急处理需立即用大量清水冲洗接触部位，吸入暴露时应转移至空气新鲜处。废弃物处置需遵守当地危险化学品管理条例，禁止直接排入下水道。

（注：实际应用前请务必查阅最新版技术手册和安全数据表，本说明基于现有研究数据整理，产品规格可能因批次调整而更新。）