

# 3-氟-4-(吗啉基)苯基异氰酸酯

*2-(2-fluoro-4-isocyanatophenyl)morpholine*

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(2-fluoro-4-isocyanatophenyl)morpholine
中文名称	3-氟-4-(吗啉基)苯基异氰酸酯
CAS 号	224323-51-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	222.216
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 2-(2-fluoro-4-isocyanatophenyl)morpholine 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 2-(2-fluoro-4-isocyanatophenyl)morpholine，中文名称为 3-氟-4-(吗啉基)苯基异氰酸酯，CAS 号为 224323-51-7。其分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>11</sub>FN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>，分子量为 222.216，常温下为无色至淡黄色液体或固体。该化合物含有高反应活性的异氰酸酯基团 (-NCO) 和吗啉环结构，赋予其独特的亲核反应特性。纯度标准为 ≥96%，需通过 HPLC 或 GC 方法验证。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族异氰酸酯衍生物，其结构中氟原子的强电负性可显著调节分子电子云分布，增强与生物靶标的结合特异性。吗啉环的刚性结构进一步提高了空间位阻效应，使其在药物化学中成为关键的中间体，常用于构建具有中枢神经系统活性的先导化合物。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中，可作为激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂等小分子药物的核心骨架。具体用于：

- 抗肿瘤药物前体的结构修饰
- 神经退行性疾病治疗剂的官能团引入
- 农药活性分子中氟代苯基的构建

实验室规模建议反应浓度为 0.1-1.0M，溶剂优先选择无水 DMF 或 THF。

#### 4. 储存条件与使用建议

需严格隔绝湿气，储存于充氮气的密闭容器中，温度控制在 -20° C 至 4° C。开封后建议一次性使用完毕，若需分装，应在干燥惰性气体环境下操作。使用前需恢复至室温并检测 NCO 基团含量（如二正丁胺滴定法）。

#### 5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含：

- 纯度（HPLC 面积归一法） $\geq 96\%$
- 水分含量（卡尔费休法） $\leq 0.5\%$
- 游离异氰酸酯二聚体含量  $< 2\%$

安全警示：该物质对呼吸道、皮肤和眼睛有强刺激性，操作需在通风橱中佩戴防毒面具及丁基手套。若接触皮肤，立即用聚乙二醇 400 冲洗后就医。废弃物需用专用异氰酸酯淬灭剂处理。

（全文共计 498 字）