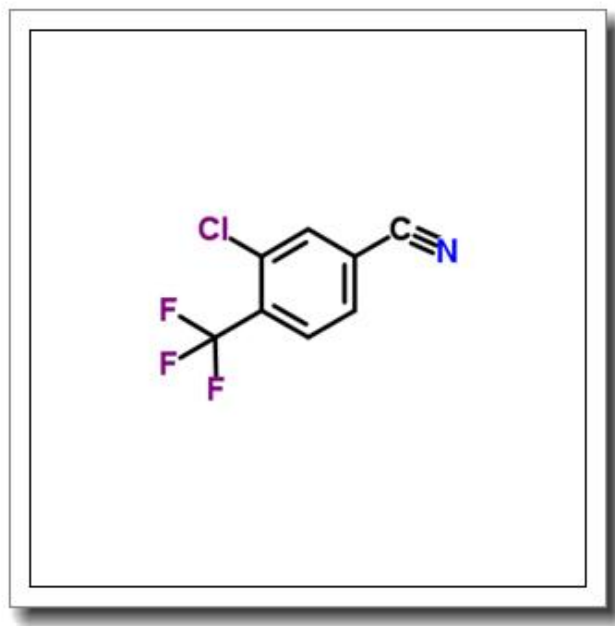


3-氯-4-三氟甲基苯腈

3-Chloro-4-(trifluoromethyl)benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Chloro-4-(trifluoromethyl)benzonitrile
中文名称	3-氯-4-三氟甲基苯腈
CAS 号	1092460-79-1
分子式	C ₈ H ₃ ClF ₃ N
分子量	205.564
纯度	≥96%

产品说明

3-氯-4-三氟甲基苯腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氯-4-三氟甲基苯腈（英文名称：3-Chloro-4-(trifluoromethyl)benzotrile）是一种含氟芳香族化合物，CAS 号为 1092460-79-1，分子式为 $C_8H_3ClF_3N$ ，分子量为 205.564。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有显著的化学稳定性和疏水性。其结构中同时包含氯原子、三氟甲基和氰基官能团，赋予其独特的电子效应和反应活性，适合作为有机合成中间体或功能材料的前体。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物，该化合物在药物化学和农药研发中具有重要价值。三氟甲基的强吸电子特性可调节分子脂溶性和代谢稳定性，而氰基则可能参与氢键形成或作为活性位点。其结构特征使其成为设计酶抑制剂或受体配体的潜在候选分子，尤其在抗肿瘤、抗炎及抗菌药物开发中受到关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- （1）医药中间体：用于合成含氟靶向药物，如激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。
- （2）农药研发：作为除草剂或杀虫剂的结构模块，通过修饰苯环提高生物活性。
- （3）材料科学：参与制备液晶材料或有机光电功能分子的合成。
- （4）科研用途：作为标准品或反应底物用于有机方法学研究和氟化学机理探索。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中，温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护，避免吸湿或氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具，在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO）和丙酮，微溶于乙醇，不推荐直接接触强酸强碱环境。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间偏差 $\leq 1\%$ 。潜在危害包括皮肤刺激性（GHS 分类 Category 2）和眼损伤风险（Category 1），安全数据表（SDS）已提供详细毒理学数据（LD50 经口大鼠 > 2000 mg/kg）。废弃处理需遵循当地法规，建议通过专业化学品回收机构处置。运输分类为 UN 3439，包装等级 III。

注：本说明基于现有实验数据编制，实际应用前请结合具体实验条件验证。