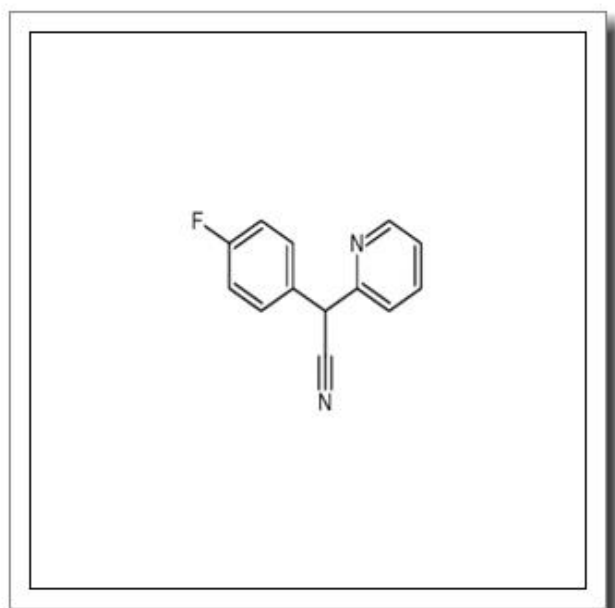


# (4-Fluorophenyl)(2-pyridinyl)acetonitrile

*(4-Fluorophenyl) (2-pyridinyl)acetonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-Fluorophenyl) (2-pyridinyl)acetonitrile
中文名称	(4-Fluorophenyl) (2-pyridinyl)acetonitrile
CAS 号	5005-42-5
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> FN <sub>2</sub>
分子量	212. 222
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### (4-氟苯基) (2-吡啶基) 乙腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 (4-Fluorophenyl) (2-pyridinyl) acetonitrile, CAS 号 5005-42-5, 分子式  $C_{13}H_9FN_2$ , 分子量 212.222, 是一种高纯度有机氟化合物。外观为白色至类白色结晶粉末, 具有芳环与氰基的特征结构, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水。其结构中氟原子与吡啶环的协同效应赋予分子独特的电子分布特性, 使其在亲核取代反应中表现出高反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物, 该分子可通过抑制特定酶活性参与生物信号传导调控, 尤其在激酶抑制研究中具有潜在价值。氟原子的引入显著增强其细胞膜穿透能力, 而吡啶基团可作为金属配位位点, 使其在金属酶模拟领域备受关注。其氰基官能团易转化为羧酸、酰胺等衍生结构, 是构建复杂生物活性分子的关键中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于抗肿瘤、抗炎药物先导化合物的结构修饰, 特别是作为 EGFR 抑制剂的核心骨架。材料科学领域用于制备含氟液晶材料或光电分子器件。

农业化学中可作为新型杀虫剂的合成前体。实验室级应用包括:

- 有机合成中构建 C-C 键的氰基化试剂
- 荧光探针的母核结构修饰
- 不对称催化反应的配体开发

#### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需避光密封, 置于  $-20^{\circ}\text{C}$  干燥环境中, 开封后建议充氮保护。使用前需恢复至室温以避免结露。工作浓度建议通过预实验确定, 常规反应体系中用量为 1-5mmol/L。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF, 若出现轻微变色不影响化学活性, 但需通过 TLC 或 HPLC 确认纯度。

## 5. 质量控制与安全信息

批次纯度经 HPLC 检测  $\geq 96\%$  (面积归一化法), 关键杂质为  $\leq 0.5\%$  的同系物二聚体。操作时需佩戴防尘口罩及丁腈手套, 避免吸入或皮肤直接接触。眼部接触后立即用生理盐水冲洗 15 分钟。废弃物应作为有害化学品处置, 不可直接排入下水道。安全数据表 (SDS) 备案号: CHEM-FFP-212-05, 详细毒理学数据参见第 12 章节。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。