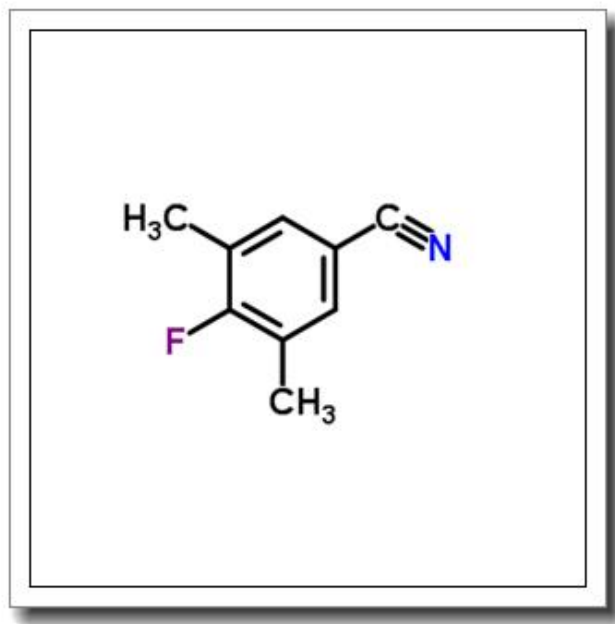


4-氟-3,5-二甲基苯甲腈

4-Fluoro-3,5-dimethylbenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Fluoro-3,5-dimethylbenzonitrile
中文名称	4-氟-3,5-二甲基苯甲腈
CAS 号	867367-02-0
分子式	C ₉ H ₈ FN
分子量	149.165
纯度	≥ 96%

产品说明

4-氟-3,5-二甲基苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氟-3,5-二甲基苯甲腈（化学名称：4-Fluoro-3,5-dimethylbenzotrile）是一种含氟芳香族化合物，分子式为 C₉H₈FN，分子量为 149.165。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，CAS 号为 867367-02-0，纯度 ≥96%。其结构中的氟原子和氰基赋予其独特的电子效应和反应活性，使其成为有机合成和药物化学中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳基氟化物和腈类化合物的结合体，4-氟-3,5-二甲基苯甲腈在生物化学领域表现出显著的活性。氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性和脂溶性，而氰基则提供了进一步官能团转化的可能性。这类结构常见于农药、医药活性分子的设计中，尤其在抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域：

- 医药中间体：作为构建含氟杂环或芳环结构的关键原料，用于合成靶向药物分子。
- 农药化学：参与开发高效低毒的含氟农药，如杀虫剂和除草剂的活性成分。
- 材料科学：作为液晶材料或高分子单体的前体，改善材料的热稳定性和光学性能。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避免光照和潮湿环境，推荐温度为 2-8℃。长期保存建议充入惰性气体（如氮气）保护。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于有机溶剂（如 DMF、DMSO），水溶性较低，配制溶液时需选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明，其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触眼睛或皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

（注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。）