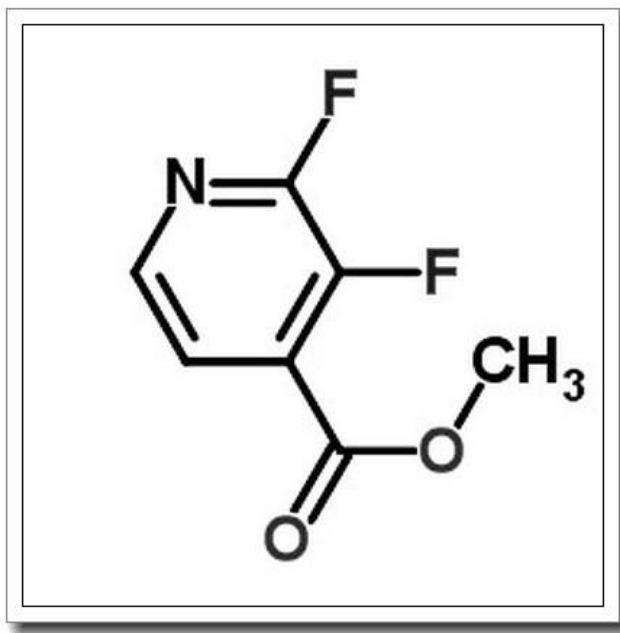


2,3-二氟吡啶-4-甲酸甲酯

Methyl 2,3-difluoroisonicotinate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2,3-difluoroisonicotinate
中文名称	2,3-二氟吡啶-4-甲酸甲酯
CAS 号	1353102-03-0
分子式	C ₇ H ₅ F ₂ N ₂ O ₂
分子量	173.117
纯度	>96%

产品说明

2,3-二氟吡啶-4-甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,3-二氟吡啶-4-甲酸甲酯 (Methyl 2,3-difluoroisonicotinate, CAS 号 1353102-03-0) 是一种含氟吡啶类衍生物, 分子式为 $C_7H_5F_2NO_2$, 分子量 173.117。本品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反应活性。其结构中的二氟取代基与甲酸甲酯官能团赋予其独特的电子效应和空间位阻, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物, 该分子在药物化学和材料科学中具有重要价值。氟原子的引入可显著改善化合物的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性, 使其成为药物设计中的关键中间体。其吡啶环结构可参与氢键形成和金属配位, 在酶抑制剂或受体调节剂的开发中具有潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药中间体合成, 具体包括: 抗肿瘤药物和抗感染药物的结构修饰; 农用化学品中活性分子的氟化改造; 有机发光材料 (OLED) 的前体合成。在交叉偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 中可作为高效底物, 也可用于构建含氟喹啉或噻吩并吡啶类杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥惰性气体环境下避光保存, 开封后需充氮气保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 反应体系需严格无水操作以确保产率。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 确保杂质含量符合标准。该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性, 安全数据表 (SDS) 编号为 CHEM-DFP-004, 应急处理需参照

GHS 分类: H315 (皮肤刺激)、H319 (眼刺激)。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理条例。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献或进行小试验证。