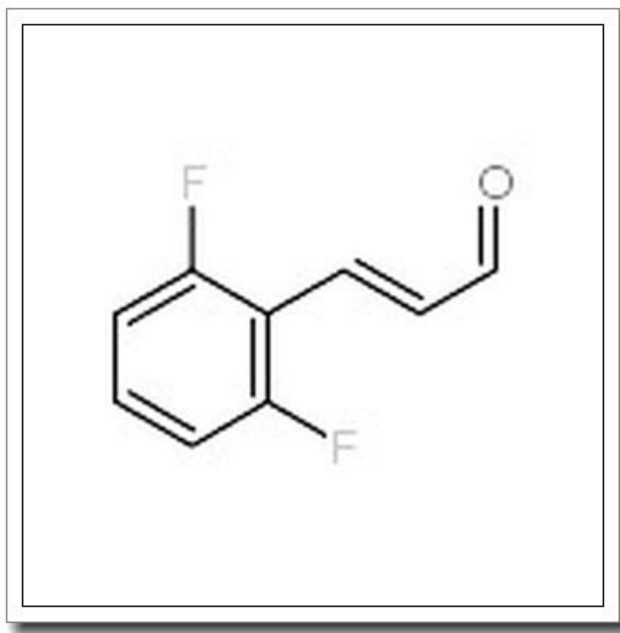


2,6-二氟肉桂醛

2,6-Difluorocinnamaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,6-Difluorocinnamaldehyde
中文名称	2,6-二氟肉桂醛
CAS 号	117338-43-9
分子式	C ₉ H ₆ F ₂ O
分子量	168.14
纯度	>96%

产品说明

2,6-二氟肉桂醛产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,6-二氟肉桂醛 (2,6-Difluorocinnamaldehyde) 是一种含氟芳香族醛类化合物, 化学式为 $C_9H_6F_2O$, 分子量 168.14, CAS 号为 117338-43-9。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 >96%, 具有典型的肉桂醛类气味。其结构中苯环 2,6 位的氟取代基赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在有机合成中表现出高反应活性。该化合物易溶于有机溶剂 (如乙醇、二氯甲烷), 微溶于水, 需避光保存以防氧化。

2. 生物化学功能与重要性

作为肉桂醛衍生物, 2,6-二氟肉桂醛是合成含氟药物和生物活性分子的关键中间体。氟原子的引入可显著改善母体化合物的脂溶性、代谢稳定性和靶标结合能力, 在药物设计中用于优化药代动力学性质。此外, 其醛基可作为亲电试剂参与缩合、加成等反应, 广泛应用于杂环化合物和手性催化剂的构建。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物化学中, 常用于合成抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的氟化结构单元; 在材料科学中, 可作为液晶材料或光电功能材料的改性前体。具体实验用途包括:

- 作为亲电试剂参与 Wittig 反应或 Knoevenagel 缩合
- 构建含氟喹啉、吲哚等杂环骨架
- 用于金属有机框架 (MOF) 材料的配体修饰

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 干燥避光环境, 惰性气体 (如氮气) 保护可延长稳定性。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解时优先选用无水级溶剂以减少副反应。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 >96%, 批次间保留时间偏差 <2%。本品对眼睛和皮肤有刺

激性，CAS 号 117338-43-9 对应的 GHS 危险标识为 H315-H319（造成皮肤和眼刺激），操作后需彻底清洗接触部位。废弃物应作为有害化学品处置，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并评估实验风险。）