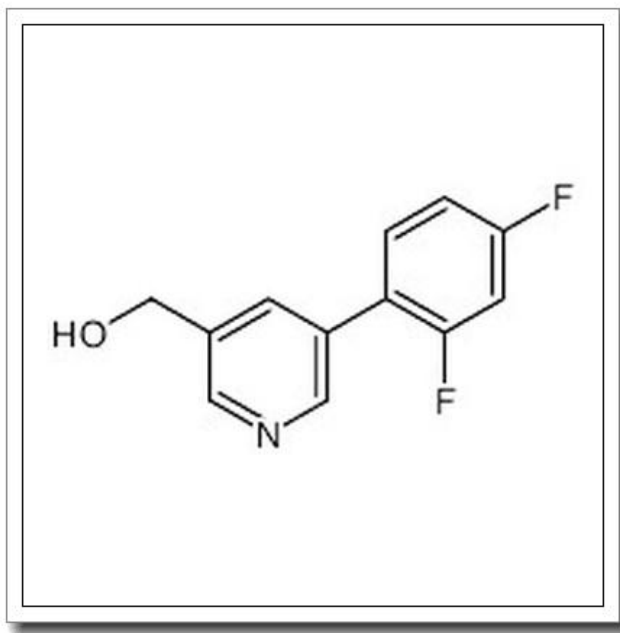


4-(5-噁唑)苯甲酸乙酯

[5-(2,4-difluorophenyl)pyridin-3-yl]methanol



产品基本信息

属性	值
化学名称	[5-(2,4-difluorophenyl)pyridin-3-yl]methanol
中文名称	4-(5-噁唑)苯甲酸乙酯
CAS 号	1261268-94-3
分子式	C ₁₂ H ₉ F ₂ N ₀
分子量	221.203
纯度	>96%

产品说明

5-(2,4-二氟苯基)吡啶-3-基甲醇产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为[5-(2,4-difluorophenyl)pyridin-3-yl]methanol, 中文别名4-(5-噁唑)苯甲酸乙酯, CAS 号为 1261268-94-3。其分子式为 C₁₂H₉F₂N₀, 分子量为 221.203, 常温下为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 检测 ≥96%。该化合物结构中的二氟苯基与吡啶甲醇基团赋予其独特的极性特征, 使其在有机溶剂如甲醇、乙腈中具有良好溶解性, 而在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物, 该分子可通过吡啶环氮原子参与配位作用, 同时其甲醇基团可作为修饰位点进行酯化或醚化反应。二氟苯基的引入显著增强化合物的代谢稳定性与膜渗透性, 使其在药物化学中成为关键的中间体, 尤其适用于设计靶向酶或受体的抑制剂类分子。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- (1) 抗肿瘤药物开发: 作为激酶抑制剂的核心骨架, 用于 EGFR 或 VEGFR 靶点化合物的合成。
- (2) 抗感染制剂: 通过结构修饰可衍生为抗真菌或抗病毒药物的活性组分。
- (3) 材料科学: 作为有机发光二极管 (OLED) 材料的前体, 参与电子传输层材料的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃下避光保存于干燥环境中, 开封后需充氮气密封以防氧化。使用前需恢复至室温并短暂离心以避免结块影响称量。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水 DMSO 或乙醇, 配制溶液建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和核磁共振 (1H NMR) 验证结构, 批次间纯度差异 <1%。安全数据表明其急性毒性 (LD50 大鼠口服) >500 mg/kg, 但仍需按有害化学品处理: 操作时佩戴护目镜与丁腈手套, 若接触眼睛需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有机卤化物分类处置, 符合当地环保法规。

注: 以上信息基于现有实验数据, 具体应用需进一步验证。获取更多技术资料请联系产品技术支持部门。