

# Methyl 2,3-difluoroisonicotinate

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2,3-difluoroisonicotinate
产品目录号	
CAS 号	1353102-03-0
分子式	C7H5F2N02
分子量	173.117
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

甲基 2,3-二氟异烟酸酯 (Methyl 2,3-difluoroisonicotinate) 是一种重要的含氟杂环化合物, 化学式为  $C_7H_5F_2NO_2$ , 分子量 173.117, CAS 号为 1353102-03-0。该化合物以异烟酸酯为母核, 在 2 位和 3 位引入氟原子, 形成高电子亲和力的结构特征。其纯度超过 96%, 常温下为白色至类白色结晶或粉末, 具有较低的极性和中等挥发性, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯等。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟吡啶衍生物, 该化合物因其独特的电子效应和空间位阻, 在药物化学中常作为关键中间体。氟原子的引入可显著改善分子的代谢稳定性、脂溶性和生物膜穿透能力, 使其在靶标结合中表现出高选择性。其在酶抑制、受体调节等领域具有潜在活性, 尤其适用于抗肿瘤、抗感染药物的结构修饰。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物设计中, 可作为构建块用于合成含氟喹啉类或吡啶类活性分子, 例如激酶抑制剂或抗菌剂的前体。在材料科学中, 可用于制备含氟液晶或光电材料。具体实验用途包括但不限于: Suzuki 偶联反应的底物、杂环化合物的氟化修饰、以及作为放射性标记化合物的合成前体。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 以保持稳定性。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥惰性氛围 (如氩气手套箱) 中操作, 防止吸湿分解。溶解推荐使用无水级溶剂, 并建议通过薄层色谱 (TLC) 或 HPLC 监测反应进程。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 确保纯度  $>96\%$ 。安全数据表明, 该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化

化学品管理法规，禁止直接排入环境。详细安全信息请参阅随货提供的MSDS（材料安全数据表）。