

Methyl 2,5-difluoronicotinate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2,5-difluoronicotinate
产品目录号	
CAS 号	1214362-39-6
分子式	C7H5F2NO2
分子量	173.117
纯度	>96%

产品说明

2, 5-二氟烟酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2, 5-二氟烟酸甲酯 (Methyl 2, 5-difluoronicotinate) 是一种含氟杂环化合物，化学式为 $C_7H_5F_2N_2O_2$ ，分子量 173.117，CAS 号为 1214362-39-6。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，具有显著的脂溶性和结构稳定性。其分子结构中的二氟取代基与酯基赋予该化合物独特的电子效应和空间位阻，使其成为有机合成中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为烟酸衍生物，该化合物可通过氟原子的强电负性调节分子反应活性，在药物化学中常用于构建含氟杂环骨架。其酯基结构易于水解或转化，为后续合成手性胺类、抑制剂或靶向药物提供关键前体。含氟基团的引入可显著改善母体分子的代谢稳定性和生物膜穿透性，在抗肿瘤、抗病毒等药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中，常用于构建含二氟吡啶结构的候选化合物，如蛋白激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂。在材料科学中，可作为液晶材料或有机半导体的改性单体。具体用途包括但不限于：帕金森病治疗药物中间体、农用化学品活性成分合成、PET 显影剂前体修饰等。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 惰性气体（如氩气）保护下避光保存，开封后需充氮密封。使用时应于干燥环境下操作，避免接触强氧化剂或强碱。溶解性测试表明，本品易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂，微溶于水 ($<0.1 \text{ mg/mL}$)。实验过程中建议佩戴丁腈手套和护目镜，并在通风橱中进行称量。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 数据显示其急性毒性类别为 4 级 ($LD_{50} > 2000 \text{ mg/kg}$)，但吸入或皮肤接触可能引起刺激。废弃物

处理需遵守当地危险化学品管理条例，建议采用专业焚烧法。运输分类为 UN 2811（6.1 类），需贴注“有害物质”标识。

注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请务必查阅最新文献并开展小试验证。