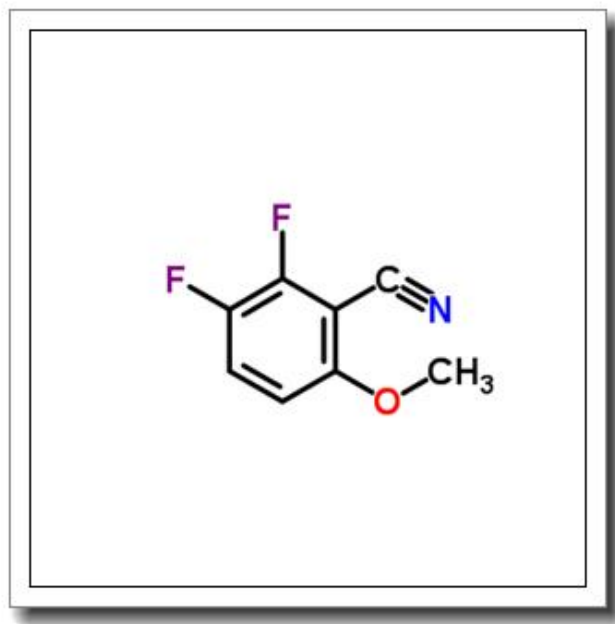


2,3-二氟-6-甲氧基苯甲腈

2,3-difluoro-6-methoxybenzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,3-difluoro-6-methoxybenzotrile
中文名称	2,3-二氟-6-甲氧基苯甲腈
CAS 号	221202-34-2
分子式	C ₈ H ₅ F ₂ N ₀
分子量	169.128
纯度	≥ 96%

产品说明

2,3-二氟-6-甲氧基苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,3-二氟-6-甲氧基苯甲腈 (2,3-difluoro-6-methoxybenzotrile) 是一种含氟芳香族化合物, 化学式为 $C_8H_5F_2NO$, 分子量为 169.128。其 CAS 号为 221202-34-2, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末。该化合物具有较高的化学稳定性, 纯度标准为 $\geq 96\%$, 适合用于精细化学合成及医药中间体制备。其结构中的氟原子和甲氧基赋予其独特的电子效应和空间位阻特性, 使其在有机合成中表现出优异的反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟苯甲腈衍生物, 该化合物在生物活性分子设计中具有重要价值。氟原子的引入可显著改善母体分子的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透能力, 因此在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰。其氰基和甲氧基可作为关键官能团参与偶联、缩合等反应, 是构建杂环化合物 (如吡啶、嘧啶类) 的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 医药中间体: 用于合成抗肿瘤、抗感染及中枢神经系统药物的含氟活性成分。
- 农药化学: 作为除草剂或杀菌剂的分子骨架修饰原料。
- 材料科学: 参与开发液晶材料或有机电致发光 (OLED) 材料的含氟单元。
- 科研用途: 在有机氟化学研究中作为标准品或反应底物。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避免光照与潮湿环境, 推荐温度为 2-8°C。长期保存建议充入惰性气体 (如氮气)。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂, 水溶性较低, 建议根据反应体系选择合适溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间质量稳定。安全数据表明其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若接触皮肤，需立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。详细毒理学数据可参考材料安全数据表（MSDS）。

注：本说明基于现有实验数据编制，实际应用前建议进行小试验证。产品规格可能因批次调整，请以随货质检报告为准。