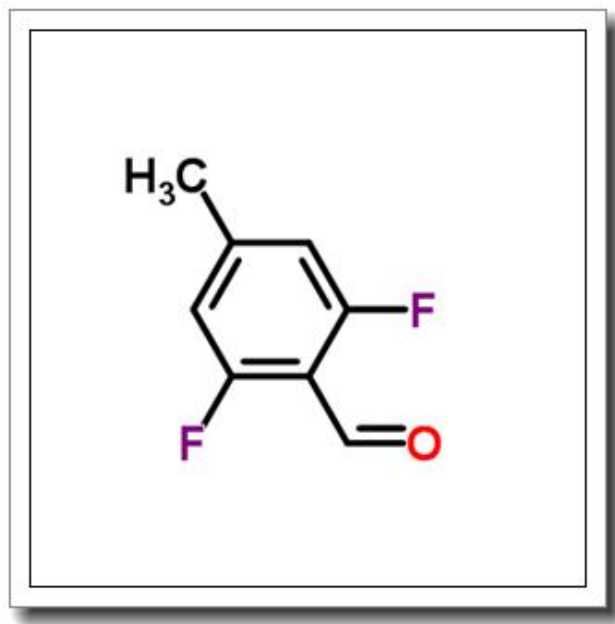


2,6-二氟-4-甲基苯甲醛

2,6-Difluoro-4-methylbenzaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,6-Difluoro-4-methylbenzaldehyde
中文名称	2,6-二氟-4-甲基苯甲醛
CAS 号	1201597-22-9
分子式	C ₈ H ₆ F ₂ O
分子量	156.129
纯度	≥ 96%

产品说明

2,6-二氟-4-甲基苯甲醛产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,6-二氟-4-甲基苯甲醛 (2,6-Difluoro-4-methylbenzaldehyde) 是一种含氟芳香醛类化合物, 化学式为 $C_8H_6F_2O$, 分子量为 156.129, CAS 号为 1201597-22-9。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的醛基反应活性。其结构中 2,6 位的氟原子增强了电子效应, 4 位甲基则提供了空间位阻, 使其在有机合成中表现出独特的反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香醛衍生物, 该化合物是构建药物活性分子的关键中间体。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性, 因此在药物化学中广泛应用于抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的研发。其醛基可作为亲电试剂参与缩合、还原胺化等反应, 是合成杂环化合物的重要前体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和材料科学领域。在医药研发中, 常用于合成含氟喹啉类、苯并咪唑类化合物; 在材料领域, 可作为液晶材料或光电功能材料的修饰基团。具体应用包括: 帕金森病药物候选分子的合成、氟代液晶单体制备, 以及作为 MOFs (金属有机框架) 材料的有机配体。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光保存于 $2-8^{\circ}C$ 干燥环境, 建议充氮保护以延长稳定性。开封后需尽快使用, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试表明, 本品易溶于甲醇、二氯甲烷, 微溶于水 ($< 0.1 \text{ mg/mL}$), 推荐使用无水 DMF 作为反应溶剂。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠经口) $> 2000 \text{ mg/kg}$, 皮肤刺激性类别 3。操作时需佩戴

防护手套、护目镜及防尘口罩，若接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）