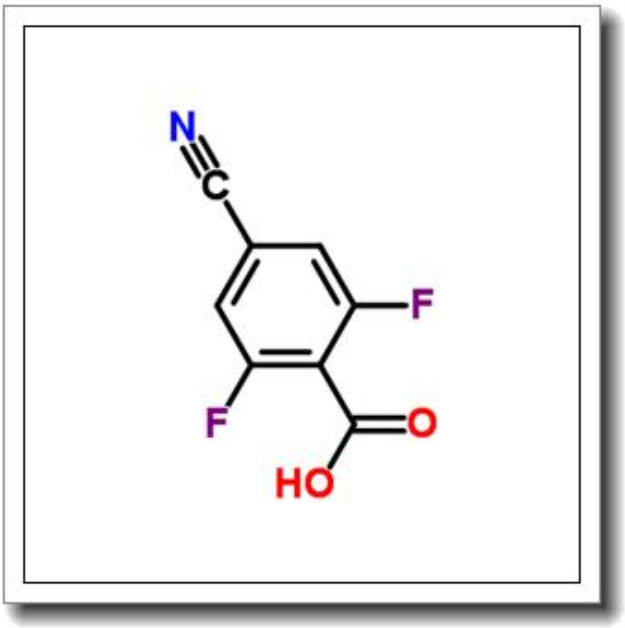
4-氰基-2,6-二氟苯甲酸

4-cyano-2,6-difluorobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-cyano-2,6-difluorobenzoic acid
中文名称	4-氰基-2,6-二氟苯甲酸
CAS 号	181073-82-5
分子式	C8H3F2NO2
分子量	183.112
纯度	≧96%

产品说明

4-氰基-2,6-二氟苯甲酸产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-氰基-2,6-二氟苯甲酸（英文名称：4-cyano-2,6-difluorobenzoic acid）是一种含氟芳香族羧酸衍生物，CAS 号为 181073-82-5，分子式为 C8H3F2NO2，分子量为 183.112。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度不低于 96%。其结构中包含氰基和羧酸官能团，且苯环上 2,6 位被氟原子取代，赋予其独特的电子效应和反应活性，适用于多种有机合成及药物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族化合物，4-氰基-2,6-二氟苯甲酸在生物化学领域具有重要价值。氟原子的引入可显著改变分子的脂溶性、代谢稳定性和生物活性，使其成为药物设计中的关键中间体。氰基和羧酸基团的存在进一步扩展了其衍生化潜力，可用于构建杂环化合物或作为配体参与金属催化反应。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中，它是合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的重要砌块；在农药化学中，可用于制备高效低毒的含氟杀虫剂或除草剂。此外，其衍生物在液晶材料、高分子改性等特种材料领域也有潜在应用。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中，温度控制在 2-8° C，长期储存需充惰性气体保护。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，本品易溶于极性有机溶剂（如 DMF、DMSO），微溶于水，可根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度≥96%，并提供详细的质量分析证书（COA）。安全方面，其急性毒性数据尚未完全明确，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。

若不慎接触眼睛或皮肤，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议交由专业化学品回收机构处置。