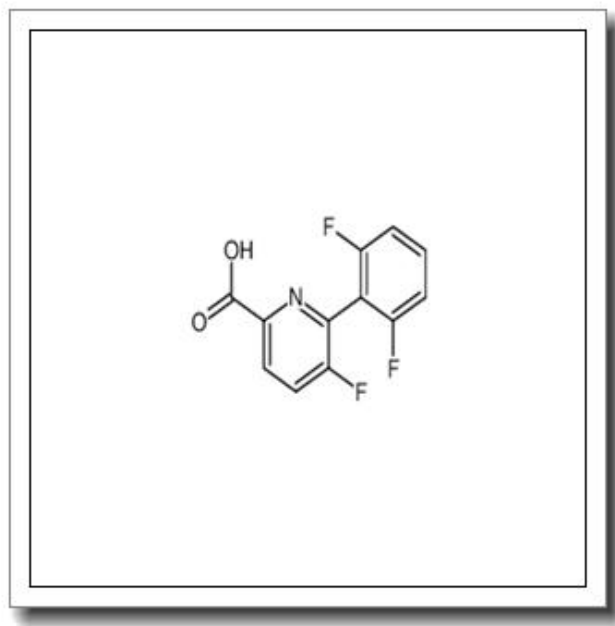


6-(2,6-二氟苯基)-5-氟邻吡啶甲酸

6-(2,6-difluorophenyl)-5-fluoropyridine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-(2,6-difluorophenyl)-5-fluoropyridine-2-carboxylic acid
中文名称	6-(2,6-二氟苯基)-5-氟邻吡啶甲酸
CAS 号	1210419-19-4
分子式	C ₁₂ H ₆ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	253.177
纯度	≥96%

产品说明

6-(2,6-二氟苯基)-5-氟邻吡啶甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 6-(2,6-difluorophenyl)-5-fluoropyridine-2-carboxylic acid，分子式 C₁₂H₆F₃N₂O₂，分子量 253.177，CAS 号 1210419-19-4。其结构中含二氟苯基与氟代吡啶甲酸基团，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。纯度 ≥96% (HPLC)，可溶于二甲基亚砜 (DMSO) 等极性有机溶剂，微溶于水 (pH 依赖性)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环羧酸衍生物，可通过羧基与金属离子或生物分子结合，其氟原子取代能增强脂溶性和代谢稳定性。在药物化学中，此类结构常作为激酶抑制剂或抗菌剂的中间体，其苯环与吡啶环的共轭体系可能参与 $\pi-\pi$ 堆积相互作用，影响靶蛋白结合活性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，尤其用于构建抗肿瘤或抗感染药物的核心骨架。具体用途包括：1) 作为小分子抑制剂的关键片段，用于 JAK 或 ALK 激酶抑制剂的合成；2) 在农药化学中用于开发新型含氟杀虫剂；3) 在材料科学中作为配体用于金属有机框架 (MOF) 材料的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。实验使用时建议在手套箱或通风橱中操作，配制溶液前需平衡至室温。水溶性实验需调节 pH 至碱性条件 (如加入 0.1M NaOH)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检，批号关联完整分析证书 (COA)。安全数据：1) 急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >500 mg/kg；2) 对皮肤/眼睛有轻微刺激性

(穿戴防护装备); 3) 遇强氧化剂可能分解产生氟化氢。废弃处理需遵循危险化学品处置规范。

(注: 实际应用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展小规模预实验。)