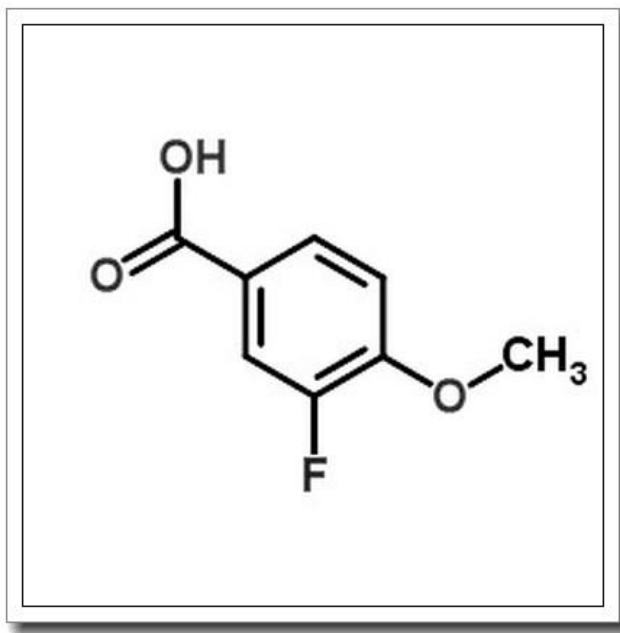


3-氟-4-甲氧基苯甲酸

3-Fluoro-4-methoxybenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Fluoro-4-methoxybenzoic acid
中文名称	3-氟-4-甲氧基苯甲酸
CAS 号	403-20-3
分子式	C ₈ H ₇ F ₀ O ₃
分子量	170.138
纯度	>96%

产品说明

3-氟-4-甲氧基苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氟-4-甲氧基苯甲酸 (3-Fluoro-4-methoxybenzoic acid) 是一种有机芳香羧酸衍生物，化学式为 $C_8H_7FO_3$ ，分子量为 170.138。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，CAS 号为 403-20-3，纯度标准 >96%。其结构特征为苯甲酸母核上 4 号位甲氧基 (-OCH₃) 与 3 号位氟原子 (-F) 的协同取代，赋予分子独特的电子效应和空间位阻，使其在极性有机溶剂（如甲醇、乙腈）中具有中等溶解性，而在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸类化合物的氟化衍生物，本品兼具羧酸的质子给体特性与氟原子的强电负性，可作为酶抑制剂或受体配体的合成中间体。甲氧基的引入增强了分子的脂溶性，使其更易穿透细胞膜，在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰。其氟原子可模拟生物体内羟基或氢键结合位点，在分子对接研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发、农药合成及材料科学领域。在医药领域，是合成非甾体抗炎药 (NSAIDs) 和抗肿瘤剂的关键砌块；在农药化学中，可用于制备具有除草或杀菌活性的苯氧羧酸类衍生物；在材料科学中，可作为液晶材料的极性调节单元。具体实验用途包括：有机合成中的羧酸保护/脱保护反应、金属催化偶联反应的底物、以及 X 射线晶体学研究的标准品。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于阴凉干燥处，长期储存温度应控制在 2-8℃，避免光照与湿气。开封后需充惰性气体（如氮气）保护。使用前需在干燥环境下平衡至室温，称量时建议使用防静电器具。溶解时可适度加热（≤60℃）或超声辅助，但需避免与强氧化剂共存。

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。安全数据：急性毒性（口服大鼠 LD50）>2000 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，接触皮肤后立即用大量清水冲洗。废弃物处置应遵守当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。

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