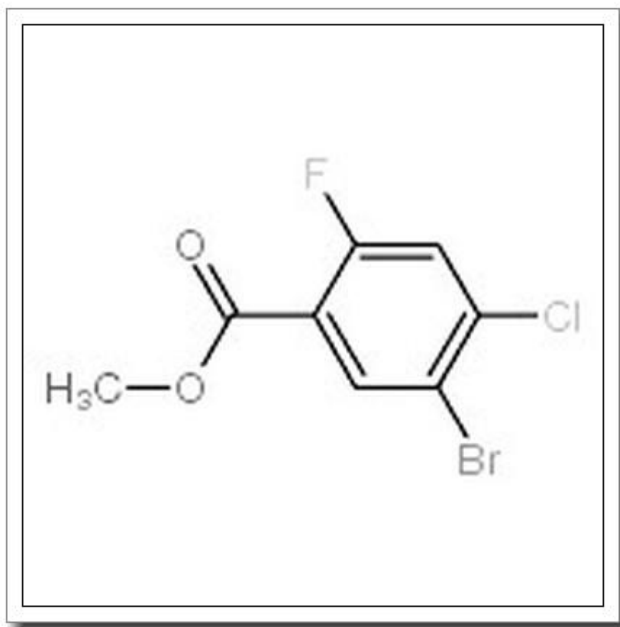


5-溴-4-氯-2-氟-苯甲酸甲酯

Methyl 5-bromo-4-chloro-2-fluorobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-bromo-4-chloro-2-fluorobenzoate
中文名称	5-溴-4-氯-2-氟-苯甲酸甲酯
CAS 号	951884-02-9
分子式	C ₈ H ₅ BrClF ₀₂
分子量	267.48
纯度	>96%

产品说明

5-溴-4-氯-2-氟-苯甲酸甲酯 (Methyl 5-bromo-4-chloro-2-fluorobenzoate) 是一种重要的有机合成中间体, 广泛应用于医药、农药和材料科学领域。其 CAS 号为 951884-02-9, 分子式为 $C_8H_5BrClF_2O_2$, 分子量为 267.48。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常大于 96%, 具有较高的化学稳定性和反应活性。

1. 产品概述与化学特性

5-溴-4-氯-2-氟-苯甲酸甲酯是一种含卤素的苯甲酸酯类化合物, 其结构中的溴、氯和氟原子赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在亲核取代反应和偶联反应中表现出优异的反应性。该化合物在常温下稳定, 但需避免强酸、强碱和强氧化剂。其熔点和沸点数据可根据需求提供。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为合成更复杂分子的关键砌块。其卤素取代基使其易于进一步功能化, 常用于构建药物分子中的芳环结构。例如, 它是合成某些抗肿瘤药物和抗炎药物的中间体, 也可用于开发新型农药活性成分。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 该化合物常用于合成靶向治疗药物, 特别是含有三取代苯环结构的药物分子。在农药领域, 它可作为杀虫剂和除草剂的合成前体。此外, 在材料科学中, 它可用于制备特殊功能的液晶材料和有机光电材料。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存, 长期储存应充入惰性气体。使用时应在通风良好的环境下操作, 避免直接接触皮肤和眼睛。开封后应尽快使用, 剩余产品需严格密封保存。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度大于 96%。MS 和 NMR 数据可供验证。该化合物属于刺

激性化学品，操作时应佩戴防护手套、护目镜和防护服。如不慎接触皮肤，应立即用大量清水冲洗。安全数据表（SDS）可提供更详细的安全信息和应急处理措施。废弃物处理需符合当地环保法规。

该产品需由专业化学人员在适当防护条件下使用，不建议未经培训的人员直接操作。如需更多技术信息或定制服务，请联系我们的技术支持团队。