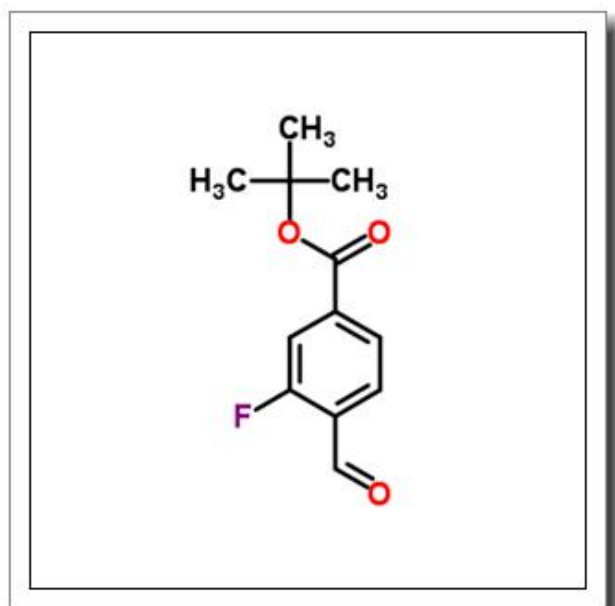


2-Methyl-2-propanyl 3-fluoro-4-formylbenzoate

2-Methyl-2-propanyl 3-fluoro-4-formylbenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl 3-fluoro-4-formylbenzoate
中文名称	2-Methyl-2-propanyl 3-fluoro-4-formylbenzoate
CAS 号	866625-12-9
分子式	C ₁₂ H ₁₃ F ₀₃
分子量	224. 228
纯度	≥ 96%

产品说明

2-Methyl-2-propanyl 3-fluoro-4-formylbenzoate 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-Methyl-2-propanyl 3-fluoro-4-formylbenzoate，中文名称为 2-甲基-2-丙烷基 3-氟-4-甲酰基苯甲酸酯，CAS 号为 866625-12-9。其分子式为 C₁₂H₁₃F₃O₃，分子量为 224.228，纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，具有苯甲酸酯类特征结构，同时含有氟原子和甲酰基官能团，赋予其独特的化学反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物，该化合物在有机合成中表现出显著的电子效应和空间位阻效应。甲酰基可作为醛基供体参与缩合反应，而氟原子的强电负性使其成为药物化学中常见的药效团修饰基团。其在构建杂环化合物、手性催化剂配体以及生物活性分子前体中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- 医药中间体：用于合成抗肿瘤、抗感染等含氟药物活性成分
- 材料科学：作为液晶材料或高分子单体的关键修饰基团
- 农药开发：参与新型含氟农药的分子结构构建
- 学术研究：作为氟标记化合物用于反应机理研究

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃至 4℃的密闭环境中，避光防潮。开封后需充惰性气体保护，避免反复冻融。使用时应在干燥惰性气氛下操作，建议佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性差。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，批次间稳定性良好。安全数据表明：

- 危险代码: Xi (刺激性物质)
- 安全术语: 避免吸入粉尘, 接触皮肤后立即用大量清水冲洗
- 废弃物处理: 需按危险化学品规范处置
- 运输分类: 非危险品, 但建议低温运输

注: 具体实验方案需根据实际应用需求优化, 建议首次使用者进行小规模预实验。更多技术参数可索取 COA 报告。