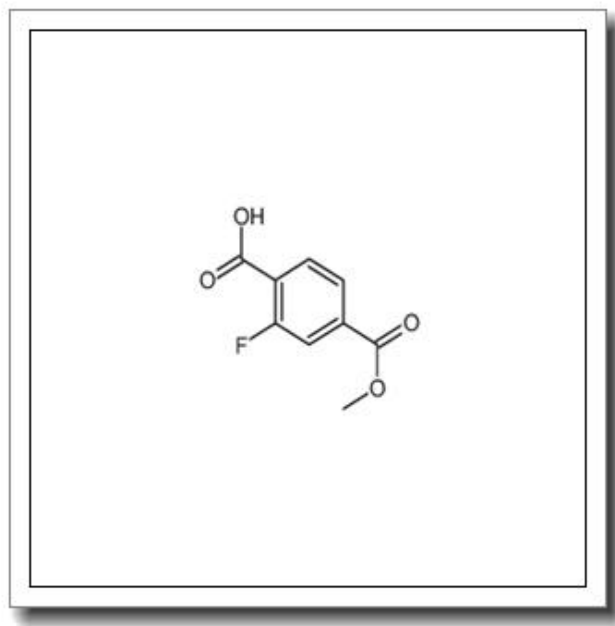


2-氟-4-(甲氧基羰基)苯甲酸

2-fluoro-4-methoxycarbonylbenzoic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 2-fluoro-4-methoxycarbonylbenzoic acid |
| 中文名称 | 2-氟-4-(甲氧基羰基)苯甲酸 |
| CAS 号 | 314241-04-8 |
| 分子式 | C ₉ H ₇ F ₀₄ |
| 分子量 | 198.148 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

2-氟-4-(甲氧基羰基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氟-4-(甲氧基羰基)苯甲酸 (CAS 号: 314241-04-8) 是一种含氟芳香族羧酸衍生物, 分子式为 $C_9H_7F_2O_4$, 分子量为 198.148。该化合物在常温下为白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具羧酸与酯基的化学特性。其结构中氟原子的强电负性与甲氧基的吸电子效应, 使其成为有机合成中重要的中间体, 尤其在构建含氟药物分子骨架时表现出高反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟苯甲酸衍生物, 本产品可通过羧基参与缩合反应或酯基水解反应, 进一步修饰为药物活性片段。氟原子的引入能显著改善母体分子的脂溶性、代谢稳定性及生物膜穿透性, 在药物设计中常用于优化先导化合物的药代动力学性质。其在酶抑制剂、抗肿瘤剂及抗菌剂研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药中间体合成领域, 具体包括:

- 作为关键原料用于合成含氟非甾体抗炎药 (NSAIDs) 或靶向抗肿瘤药物
- 在 PET 显影剂开发中作为放射性氟标记的前体化合物
- 用于制备液晶材料或高分子聚合物的功能性单体
- 在农药化学中构建含氟杂环结构

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存于 $2-8^{\circ}C$ 密封容器中, 避免与强氧化剂、强碱接触。使用前需恢复至室温并保持环境干燥, 称量时建议在惰性气体保护下操作。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等极性有机溶剂, 水溶性较低 (< 0.1 g/L, $25^{\circ}C$), 实验配制时需选择适当溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 < 10 ppm, 符合医药级试剂标准。安

全数据表明其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。皮肤接触后需立即用大量清水冲洗，若吸入粉尘应转移至空气新鲜处。废弃物处置需遵守当地化学品管理法规，避免直接排放至环境中。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。