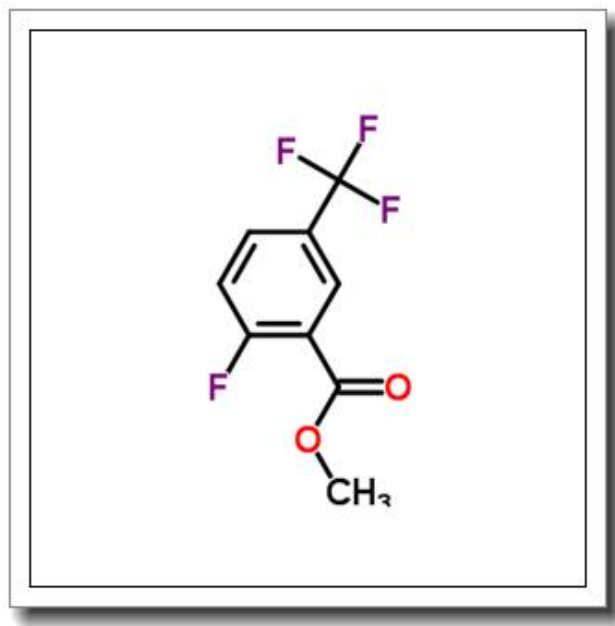


2-氟-5-三氟甲基苯甲酸甲酯

Methyl 2-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoate
中文名称	2-氟-5-三氟甲基苯甲酸甲酯
CAS 号	556112-92-6
分子式	C ₉ H ₆ F ₄ O ₂
分子量	222.136
纯度	≥96%

产品说明

2-氟-5-三氟甲基苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氟-5-三氟甲基苯甲酸甲酯 (Methyl 2-fluoro-5-(trifluoromethyl)benzoate, CAS 号 556112-92-6) 是一种含氟芳香族化合物, 分子式为 $C_9H_6F_4O_2$, 分子量 222.136。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有较高的化学稳定性, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中的氟原子和三氟甲基基团赋予其独特的电子效应和疏水性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟苯甲酸酯衍生物, 该化合物可通过酯基水解生成相应的羧酸, 进一步参与偶联反应或作为中间体修饰其他分子。三氟甲基的强吸电子特性可显著改变母核的电子云分布, 影响其与生物靶标的相互作用, 因此在药物设计 (如激酶抑制剂或抗炎药物开发) 中常作为关键药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和农药中间体合成, 具体包括:

1. 作为含氟药物 (如抗肿瘤或抗病毒化合物) 的结构模块
2. 用于构建液晶材料或特种高分子单体的前体
3. 在有机催化反应中作为手性配体的合成原料
4. 农药活性分子 (如除草剂) 的氟化修饰

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 避免与强氧化剂或强酸接触。溶解性测试表明其易溶于乙醚、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具。若不慎接触皮肤, 应立即用大量

清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地危险化学品管理条例，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺验证。技术参数可能因批次略有差异，请以随货质检报告为准。）