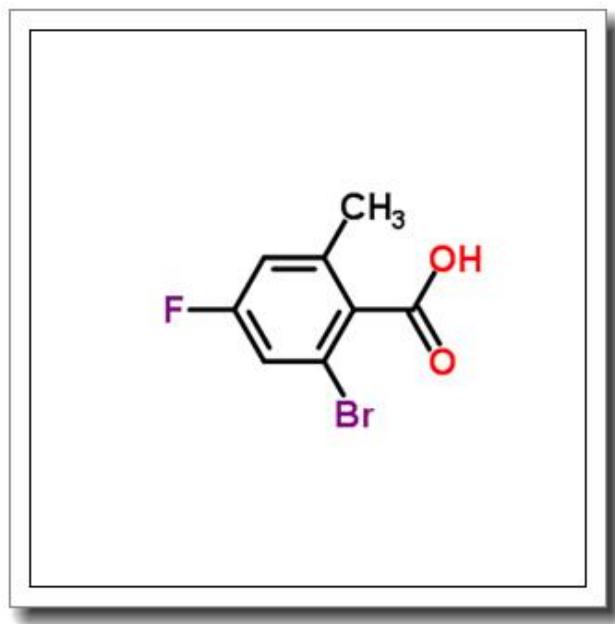


# 2-溴-4-氟-6-甲基苯甲酸

*2-Bromo-4-fluoro-6-methylbenzoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Bromo-4-fluoro-6-methylbenzoic acid
中文名称	2-溴-4-氟-6-甲基苯甲酸
CAS 号	1003709-47-4
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> BrF <sub>2</sub>
分子量	233.034
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-溴-4-氟-6-甲基苯甲酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-溴-4-氟-6-甲基苯甲酸 (2-Bromo-4-fluoro-6-methylbenzoic acid) 是一种芳香族羧酸衍生物，化学式为  $C_8H_6BrFO_2$ ，分子量为 233.034。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，CAS 号为 1003709-47-4，纯度  $\geq 96\%$ 。其结构中的溴、氟和甲基取代基赋予其独特的电子效应和空间位阻，使其在有机合成中表现出较高的反应选择性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为多官能团苯甲酸衍生物，该化合物兼具卤素原子的亲电反应活性和羧酸的酸性特性。氟原子的强电负性可显著改变分子电子云分布，而溴原子则为后续偶联反应（如 Suzuki 偶联）提供关键位点。这些特性使其成为药物化学和材料科学中重要的中间体，尤其在构建含氟杂环化合物和功能性芳烃方面具有不可替代的作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于合成抗肿瘤、抗炎药物的活性分子骨架；在农药化学中，可作为含氟杀虫剂或除草剂的前体；在材料科学中，用于制备液晶材料或有机光电功能分子。具体应用包括但不限于：作为钯催化交叉偶联反应的底物、羧酸官能团衍生化的起始原料，以及通过脱羧反应构建复杂芳环体系。

#### 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。开封后应密封防潮，避免与强氧化剂、强碱接触。使用时应佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂，水溶性较差 ( $< 0.1 \text{ mg/mL}$ ,  $25^{\circ}C$ )。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，重金属含量  $< 10 \text{ ppm}$ 。安全数据表明其具有刺激性，可能引起皮肤、眼睛和呼吸道刺激。操作时应遵守 GHS 分类：H315（造成皮肤

刺激)、H319 (造成严重眼刺激)、H335 (可能引起呼吸道刺激)。如发生接触,立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

(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验证。产品规格可能因批次调整,请以随货质检报告为准。)