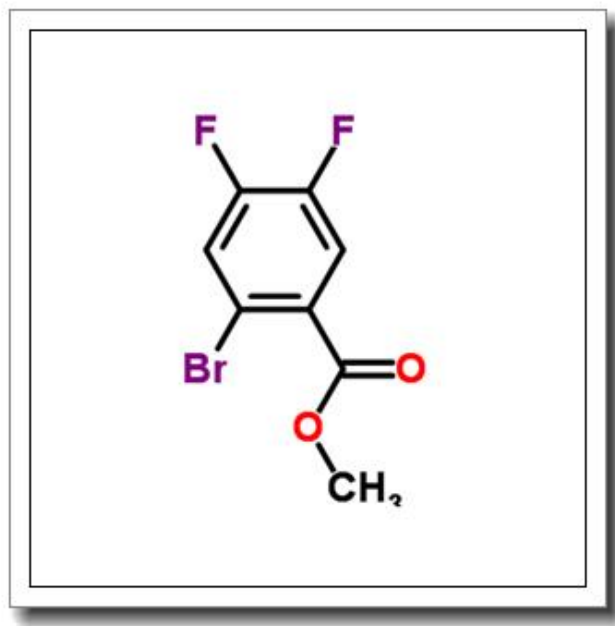


2-溴-4,5-二氟苯甲酸甲酯

Methyl 2-bromo-4,5-difluorobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-bromo-4,5-difluorobenzoate
中文名称	2-溴-4,5-二氟苯甲酸甲酯
CAS 号	878207-28-4
分子式	C ₈ H ₅ BrF ₂ O ₂
分子量	251.025
纯度	≥96%

产品说明

2-溴-4,5-二氟苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-溴-4,5-二氟苯甲酸甲酯 (Methyl 2-bromo-4,5-difluorobenzoate) 是一种含溴和氟取代基的苯甲酸酯类化合物, CAS 号为 878207-28-4, 分子式为 $C_8H_5BrF_2O_2$, 分子量为 251.025。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有芳香气味, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和乙醚, 微溶于水。其结构中的溴和氟原子赋予其较高的反应活性, 适合作为有机合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为多官能团化合物, 2-溴-4,5-二氟苯甲酸甲酯在生物化学领域主要用于修饰分子结构, 引入卤素和酯基以改变化合物的极性、稳定性和生物活性。其溴原子可作为亲电反应位点参与偶联反应, 而氟原子的强电负性可增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 因此在药物设计和材料科学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成抗肿瘤、抗病毒药物的重要中间体; 在农药领域, 可用于制备高效低毒的含氟杀虫剂或除草剂; 在材料科学中, 可作为液晶材料或高分子单体的前体。此外, 它也常用于学术研究中的有机合成实验。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $2-8^{\circ}C$ 的干燥避光环境中储存, 密封保存以避免吸湿和氧化。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 推荐使用极性有机溶剂 (如 DMF 或 DMSO) 进行溶解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 其具有刺激

性，可能引起皮肤和眼睛不适。操作时需佩戴防护手套、护目镜和实验服，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。

(全文共计 458 字)