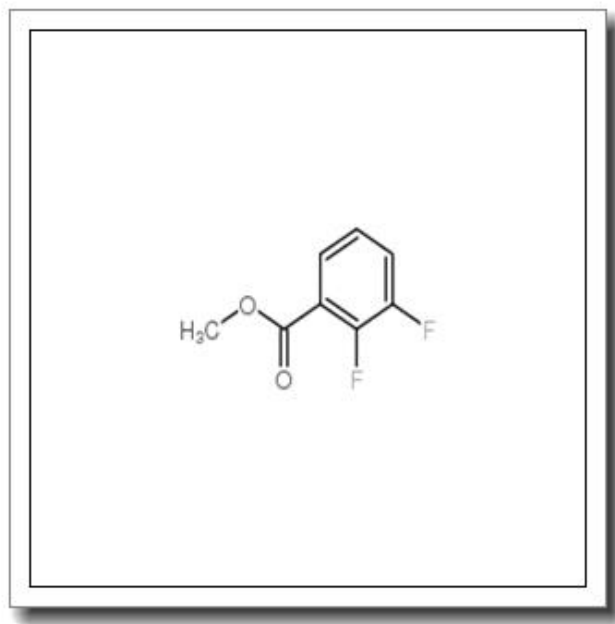


2,3-二氟苯甲酸甲酯

methyl 2,3-difluorobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 2,3-difluorobenzoate
中文名称	2,3-二氟苯甲酸甲酯
CAS 号	18355-74-3
分子式	C ₈ H ₆ F ₂ O ₂
分子量	172.129
纯度	≥ 96%

产品说明

2,3-二氟苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,3-二氟苯甲酸甲酯 (methyl 2,3-difluorobenzoate) 是一种含氟芳香族化合物, 化学式为 $C_8H_6F_2O_2$, 分子量 172.129。该物质为无色至淡黄色液体, 具有酯类特征气味, 沸点约 $205^{\circ}C$, 密度 1.28 g/cm^3 ($25^{\circ}C$), 折射率 1.468-1.472。其 CAS 号为 18355-74-3, 纯度 $\geq 96\%$, 主要杂质为同分异构体及未反应原料。该化合物在有机溶剂 (如甲醇、乙醚) 中易溶, 水中溶解度低 ($< 0.1\text{ g/100 mL}$)。

2. 生物化学功能与重要性

作为氟代苯甲酸酯衍生物, 其分子中的氟原子赋予化合物独特的电子效应和脂溶性, 可显著改变母体分子的生物活性与代谢稳定性。在药物化学中, 氟原子的引入常用于调节化合物的 pKa 值、膜穿透性及与靶标蛋白的相互作用。该结构单元是合成抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和农药领域:

- (1) 医药中间体: 用于合成含二氟苯基的非甾体抗炎药 (如 COX-2 抑制剂) 及抗抑郁药物;
- (2) 农药合成: 作为杀菌剂和除草剂的关键砌块, 例如含氟苯氧羧酸类除草剂;
- (3) 材料科学: 用于制备液晶材料中的氟代芳香族单元;
- (4) 科研用途: 作为有机氟化学研究的标准品或反应底物。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避免光照与潮湿, 推荐温度 $2-8^{\circ}C$ 。运输时需贴腐蚀性标签, 远离氧化剂与强碱。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防化手套与护目镜。若需长期保存, 建议充氮气保护以延缓水解。开封后建议 6 个月内使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 GC-MS 和 HPLC 双重检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据如下:

- (1) GHS 危害分类：皮肤腐蚀/刺激（类别 2）、严重眼损伤/刺激（类别 1）；
- (2) 急救措施：皮肤接触后立即用肥皂水冲洗 15 分钟，眼睛接触需用生理盐水冲洗并就医；
- (3) 废弃处置：按危险化学品处理，不可直接排入下水道。

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。