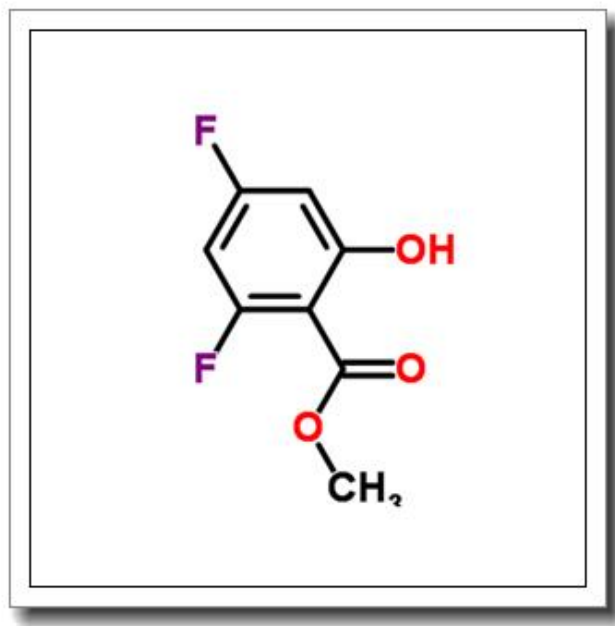


2,4-二氟-6-羟基苯甲酸甲酯

Methyl 2,4-difluoro-6-hydroxybenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2,4-difluoro-6-hydroxybenzoate
中文名称	2,4-二氟-6-羟基苯甲酸甲酯
CAS 号	773874-16-1
分子式	C ₈ H ₆ F ₂ O ₃
分子量	188.128
纯度	≥96%

产品说明

2,4-二氟-6-羟基苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,4-二氟-6-羟基苯甲酸甲酯 (Methyl 2,4-difluoro-6-hydroxybenzoate) 是一种含氟芳香族化合物，化学式为 $C_8H_6F_2O_3$ ，分子量 188.128，CAS 号为 773874-16-1。本品为白色至类白色结晶或粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有苯环上氟取代基特有的电子效应和空间位阻特性。其结构中同时包含羟基和甲酯基团，使其兼具亲水性和脂溶性，适合作为有机合成中间体或生物活性分子修饰的原料。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其氟原子的强电负性和羟基的氢键形成能力，在药物化学中常用于调节分子的脂溶性、代谢稳定性和靶标结合活性。氟代芳环结构能显著增强化合物的膜穿透性，而甲酯基团可通过水解反应进一步衍生化，使其成为构建抗生素、抗肿瘤剂或农药活性成分的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，本品可用于合成氟喹诺酮类抗生素的侧链片段或酪氨酸激酶抑制剂的前体。农药工业中，其作为含氟杀虫剂或除草剂的修饰基团，可提高生物利用度。此外，在材料科学中，该化合物可作为液晶材料的氟代芳香单元，改善材料的光电性能。实验室中常用于研究氟代芳烃的亲核取代反应机理。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性环境中，长期储存温度应控制在 $2-8^{\circ}C$ 。开封后需充氮保护以防吸潮氧化。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，本品易溶于甲醇、乙腈等有机溶剂，水溶性较低 (< 0.1 mg/mL)，建议先用极性有机溶剂助溶。

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 ppm，水分含量 $\leq 0.5\%$ 。安全数据表明，其急性毒性 (LD50 大鼠经口) > 500 mg/kg，但仍需按有害化学品规范处

理。操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，若接触眼睛需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。