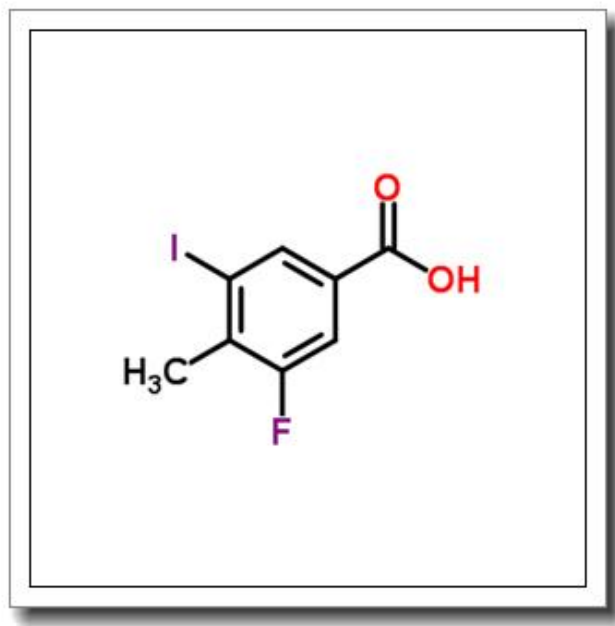


3-氟-4-甲基-5-碘苯甲酸

3-fluoro-5-iodo-4-methylbenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-fluoro-5-iodo-4-methylbenzoic acid
中文名称	3-氟-4-甲基-5-碘苯甲酸
CAS 号	861905-94-4
分子式	C ₈ H ₆ FI ₂ O ₂
分子量	280.035
纯度	≥96%

产品说明

3-氟-4-甲基-5-碘苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氟-4-甲基-5-碘苯甲酸（英文名称：3-fluoro-5-iodo-4-methylbenzoic acid）是一种含卤素取代的苯甲酸衍生物，其 CAS 号为 861905-94-4，分子式为 $C_8H_6FI_2O_2$ ，分子量为 280.035。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有显著的芳香羧酸特性，同时因氟和碘原子的引入而表现出独特的电子效应和空间位阻，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

作为多官能团修饰的苯甲酸衍生物，该化合物可通过羧基进行酯化、酰胺化等反应，氟原子的强电负性可调节芳环电子密度，而碘原子则提供了进一步偶联反应（如 Suzuki 偶联）的活性位点。这些特性使其成为合成复杂有机分子（如药物中间体、液晶材料或荧光探针）的关键砌块，尤其在靶向药物设计和放射性标记领域具有潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、材料科学及精细化工领域。具体用途包括：

- 作为非甾体抗炎药或抗菌药物的结构修饰前体
- 用于构建含氟液晶材料的核心骨架
- 在 PET 显影剂开发中作为碘标记的中间体
- 有机催化反应中的配体或助催化剂

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8℃ 的干燥避光环境中密封保存，长期储存需充入惰性气体（如氮气）。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO）和部分极性有机溶剂，水溶性较差，建议预先用少量有机溶剂助溶。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及实验服。若接触眼睛，需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。技术参数更新恕不另行通知，请以最新 COA 为准。）