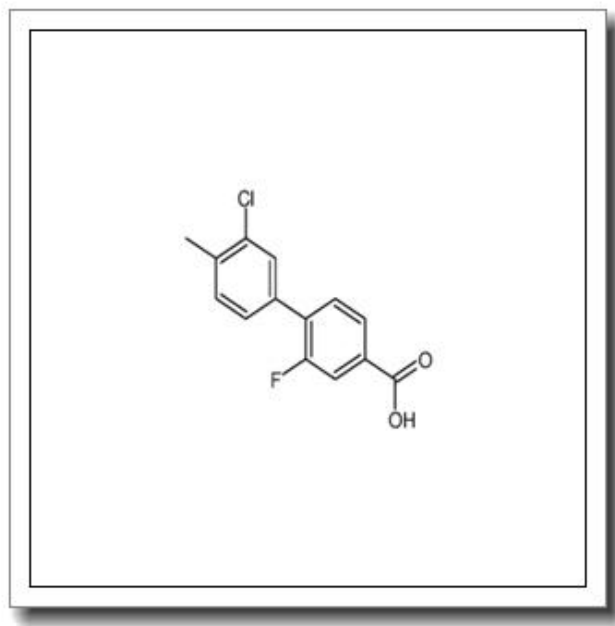


3-氯-2-氟-4-甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸

4-(3-chloro-4-methylphenyl)-3-fluorobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(3-chloro-4-methylphenyl)-3-fluorobenzoic acid
中文名称	3-氯-2-氟-4-甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸
CAS 号	1261965-53-0
分子式	C ₁₄ H ₁₀ ClF ₂ O ₂
分子量	264.679
纯度	≥96%

产品说明

3-氯-2-氟-4-甲基-[1,1-联苯]-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(3-氯-4-甲基苯基)-3-氟苯甲酸 (4-(3-chloro-4-methylphenyl)-3-fluorobenzoic acid), CAS 号为 1261965-53-0, 分子式 $C_{14}H_{10}ClF_2$, 分子量 264.679。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物属于芳香族羧酸衍生物, 结构中含氯、氟取代基及甲基官能团, 具有显著的电子效应和空间位阻特性, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为多官能团芳烃化合物, 其羧酸基团可参与酯化、酰胺化等反应, 而卤素取代基 (氯、氟) 赋予其作为中间体在偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 中的高反应性。氟原子的引入可增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰, 以优化生物利用度或靶标结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药领域的高效中间体。在药物研发中, 可用于构建激酶抑制剂或抗炎药物的核心骨架; 在农用化学品领域, 可作为合成新型除草剂或杀菌剂的关键模块。此外, 在材料科学中, 其刚性联苯结构可用于液晶材料的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。溶解性测试表明, 该产品易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂, 水溶性较低, 建议先用极性有机溶剂助溶后再进行后续稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 批号相关 COA 可随货提供。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 属中等危害类别 (GHS 分类: 急性毒性 4 类), 需避免吸入或皮肤直接

接触。废弃物处理应遵循当地法规，建议采用专业化学废弃物焚烧方式。如发生泄漏，需用惰性吸附材料收集并转移至密闭容器。

注：本说明基于现有实验数据编制，实际应用前请结合具体实验条件进行验证。