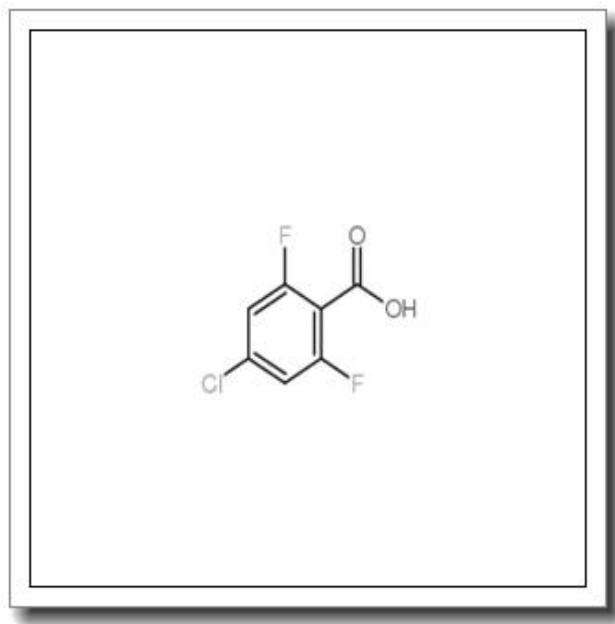


4-氯-2,6-二氟苯甲酸

4-chloro-2,6-difluorobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-chloro-2,6-difluorobenzoic acid
中文名称	4-氯-2,6-二氟苯甲酸
CAS 号	196194-58-8
分子式	C ₇ H ₃ ClF ₂ O ₂
分子量	192.547
纯度	≥ 96%

产品说明

4-氯-2,6-二氟苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氯-2,6-二氟苯甲酸（化学名称：4-chloro-2,6-difluorobenzoic acid）是一种含卤素取代的苯甲酸衍生物，CAS 号为 196194-58-8，分子式为 $C_7H_3ClF_2O_2$ ，分子量为 192.547。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有芳环结构的典型化学稳定性，同时因氯和氟原子的引入表现出独特的电子效应和空间位阻特性。其羧酸基团可参与酯化、酰胺化等反应，是重要的有机合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为多卤代苯甲酸类化合物，该分子可通过干扰酶活性或作为代谢类似物影响生物过程。其结构中的卤素原子能增强脂溶性，提升细胞膜穿透能力，在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰。此外，氟原子的引入可显著改变分子的 pKa 值和代谢稳定性，使其在农药和医药研发中具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中，常用于抗菌剂、抗肿瘤药物的结构砌块；在农药领域，作为除草剂和杀菌剂的合成前体；在材料科学中，可用于液晶材料或高分子单体的功能化修饰。具体实验场景包括 Suzuki 偶联反应、亲核取代反应等交叉偶联反应。

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，储存温度 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。使用前需恢复至室温并避免吸湿。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，确保通风良好。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜（DMSO）和部分有机溶剂，水溶性较低，建议根据实验需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表明，其对眼睛和皮肤有刺激性，CAS 号 196194-58-8 对应的 GHS 分类为 H315-H319-H335。若不

慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵守当地法规，避免直接排放至环境中。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验体系进一步验证。