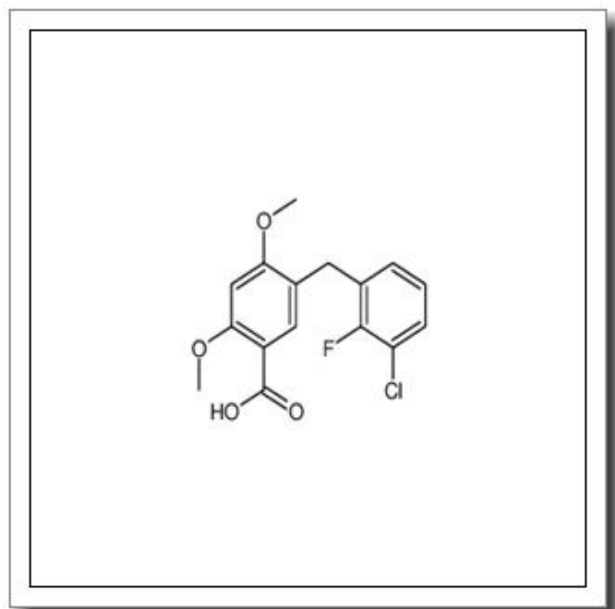


5-[(3-氯-2-氟苯基)甲基]-2,4-二甲氧基-苯甲酸

5-(3-chloro-2-fluorobenzyl)-2,4-dimethoxybenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(3-chloro-2-fluorobenzyl)-2,4-dimethoxybenzoic acid
中文名称	5-[(3-氯-2-氟苯基)甲基]-2,4-二甲氧基-苯甲酸
CAS 号	949465-79-6
分子式	C ₁₆ H ₁₄ ClF ₀₄
分子量	324.731
纯度	≥96%

产品说明

5-(3-氯-2-氟苄基)-2,4-二甲氧基苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-(3-chloro-2-fluorobenzyl)-2,4-dimethoxybenzoic acid，分子式 C₁₆H₁₄ClF₀₄，分子量 324.731，CAS 号 949465-79-6。其结构中含氯、氟取代基及甲氧基修饰的苯甲酸骨架，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇，微溶于水 (25°C 时溶解度 <0.1 mg/mL)。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳基羧酸衍生物，该化合物可通过羧基与靶标蛋白形成氢键或离子相互作用，同时氟、氯原子的引入增强其脂溶性和膜穿透能力。其二甲氧基结构可能参与 $\pi-\pi$ 堆积作用，在分子识别中发挥关键作用。在药物化学中，此类结构常作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的药效团核心。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域：

- 作为中间体用于合成抗肿瘤或抗炎先导化合物
- 用于构建 DNA 拓扑异构酶抑制剂的分子骨架
- 在荧光探针开发中作为信号修饰基团
- 学术研究中用于探索卤键在分子对接中的作用机制

4. 储存条件与使用建议

长期储存需避光、密封保存于 -20°C 干燥环境中，短期使用可置于 4°C。建议开封后充入惰性气体 (如氮气) 保护。工作溶液需现配现用，避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，推荐使用聚丙烯材质的容器盛装。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (C18 柱，甲醇/水梯度洗脱) 和质谱 (ESI-MS) 双重验证纯度。危险代码 Xi (刺激性)，安全术语 S26 (接触眼睛立即冲洗)、S37/39 (戴手套和护目

镜)。LD50 (大鼠口服) 尚未完全确定, 建议按潜在有害化学品处理。废弃物应作为有机卤化物分类处置, 符合当地环保法规。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验设计进一步验证。)