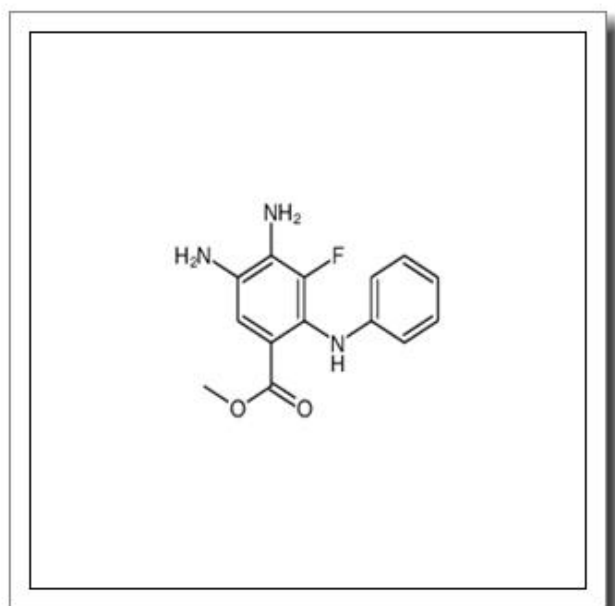


methyl 4,5-diamino-2-anilino-3-fluorobenzoate

methyl 4,5-diamino-2-anilino-3-fluorobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4,5-diamino-2-anilino-3-fluorobenzoate
中文名称	methyl 4,5-diamino-2-anilino-3-fluorobenzoate
CAS 号	606144-42-7
分子式	C14H14FN3O2
分子量	275.278
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

甲基 4,5-二氨基-2-苯胺基-3-氟苯甲酸酯 (methyl 4,5-diamino-2-anilino-3-fluorobenzoate) 是一种有机氟化合物, 化学式为 $C_{14}H_{14}FN_3O_2$, 分子量为 275.278。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, CAS 号为 606144-42-7, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中含有苯胺基团和氟原子, 赋予其独特的化学性质, 如较高的反应活性和选择性。该化合物在极性有机溶剂 (如甲醇、乙醇、二甲基亚砷) 中具有良好的溶解性, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物, 该化合物在生物化学领域具有重要应用价值。其分子中的二氨基和苯胺基团可作为活性位点参与多种偶联反应, 而氟原子的引入可增强其脂溶性和代谢稳定性。这类结构常被用于药物中间体或生物探针的设计, 尤其在靶向酶抑制剂的开发中表现出潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是合成唑啉类或苯并咪唑类化合物的关键中间体, 可能用于抗肿瘤或抗感染药物的开发。此外, 在材料科学中, 可作为荧光染料或光电材料的修饰基团。实验室中亦用于研究含氟芳烃的偶联反应机制。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应避免反复冻融, 以防降解。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气) 下操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMF 或 DMSO, 配制溶液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间稳定性经质谱和核磁验证。安全信息显示其可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作应在通风橱中进行。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。MSDS 可应要求提供。

注：以上数据基于实验室环境，实际应用前请进行小试验证。