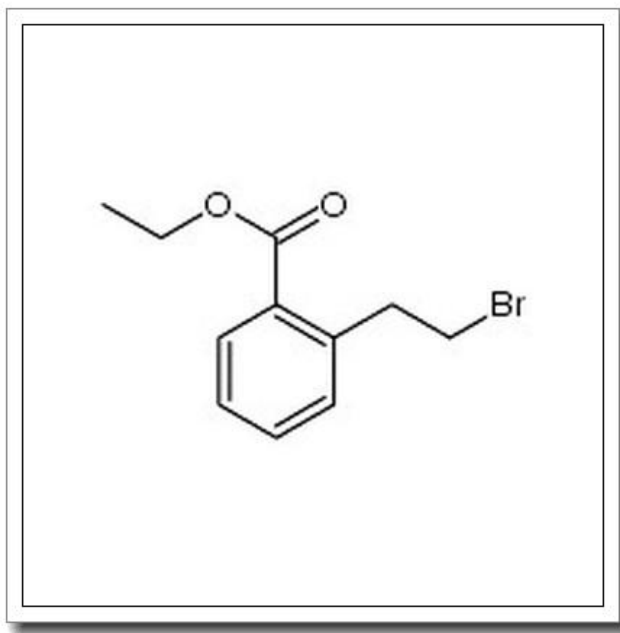


2-(2-溴乙基)苯甲酸乙酯

Benzoic acid, 2- (2- bromoethyl) - , ethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzoic acid, 2- (2- bromoethyl) - , ethyl ester
中文名称	2-(2-溴乙基)苯甲酸乙酯
CAS 号	179994-91-3
分子式	C ₁₁ H ₁₃ BrO ₂
分子量	257.124
纯度	>96%

产品说明

2-(2-溴乙基)苯甲酸乙酯产品说明书

产品概述与化学特性

2-(2-溴乙基)苯甲酸乙酯 (Benzoic acid, 2-(2-bromoethyl)-, ethyl ester) 是一种有机溴化物, 化学式为 $C_{11}H_{13}BrO_2$, 分子量 257.124, CAS 号 179994-91-3。本品为无色至淡黄色液体, 纯度 >96%, 具有典型的酯类气味。其结构中包含苯甲酸乙酯骨架和溴乙基活性基团, 使其兼具芳香性和亲电反应活性, 易溶于有机溶剂如乙醇、乙醚和氯仿, 但在水中溶解度较低。

生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成中作为重要的中间体, 其溴乙基官能团可通过亲核取代反应进一步衍生化, 常用于构建复杂分子结构。在生物化学研究中, 其酯键可被特定酶水解, 释放苯甲酸衍生物, 适用于药物代谢和酶活性研究。此外, 溴原子的存在使其成为金属催化偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 的理想底物, 在医药和材料科学领域具有潜在价值。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成抗肿瘤、抗炎药物先导化合物, 尤其是含苯环结构的靶向分子。
2. 材料科学: 作为单体或交联剂参与高分子材料合成, 改善材料的光学或机械性能。
3. 农药开发: 衍生为具有生物活性的溴代芳烃类杀虫剂或杀菌剂。
4. 科研试剂: 在有机化学教学中演示亲核取代反应机理, 或作为分析标准品使用。

储存条件与使用建议

本品需避光保存于 2-8°C 的干燥环境中, 短期使用可置于阴凉通风处。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作, 避免吸入蒸气或接触皮肤。与强氧化剂、强碱分开存放, 防止分解或副反应。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，水分含量<0.5%，重金属残留符合 ACS 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50 大鼠口服）为 1200 mg/kg，属于低毒类，但可能对眼睛和呼吸道黏膜产生刺激。废弃处理需遵循危险化学品规范，建议通过专业机构焚烧降解。

注：以上信息基于现有实验数据，具体应用需进一步验证。