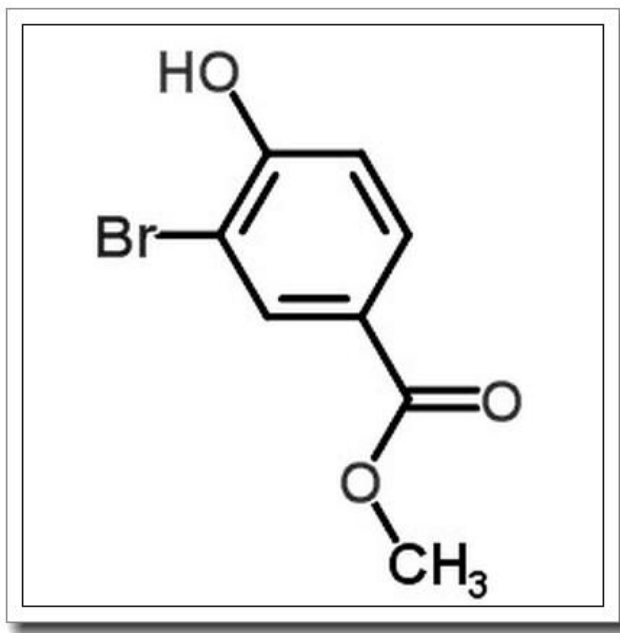


3-溴-4-羟基苯甲酸甲酯

Methyl 3-bromo-4-hydroxybenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 3-bromo-4-hydroxybenzoate
中文名称	3-溴-4-羟基苯甲酸甲酯
CAS 号	29415-97-2
分子式	C ₈ H ₇ BrO ₃
分子量	231.043
纯度	>96%

产品说明

3-溴-4-羟基苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-4-羟基苯甲酸甲酯 (Methyl 3-bromo-4-hydroxybenzoate) 是一种有机溴化物, 化学式为 $C_8H_7BrO_3$, 分子量 231.043。该化合物为白色至类白色结晶粉末, CAS 号为 29415-97-2, 纯度通常高于 96%。其结构包含苯甲酸甲酯骨架, 在 3 位和 4 位分别被溴原子和羟基取代, 赋予其独特的反应活性。该物质易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和乙醚, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳香族化合物的衍生物, 3-溴-4-羟基苯甲酸甲酯在有机合成中具有重要价值。溴原子的存在使其成为 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应的理想底物。羟基和酯基的共存提供了进一步的官能团化可能性, 例如通过酯水解或羟基的醚化反应进行结构修饰。这些特性使其在药物化学和材料科学中具有广泛的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体和精细化学品的合成。在药物研发中, 它是构建抗菌剂、抗炎药和抗癌药物的重要砌块。此外, 在材料科学领域, 它可作为液晶材料或高分子单体的前体。实验室中常用于研究芳香族亲电取代反应的机理, 以及作为标准品用于分析方法的开发与验证。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 推荐使用二甲基亚砜 (DMSO) 或二氯甲烷作为溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$ (面积归一化法)。MS 和 NMR 谱图数据可应要求提供。安全数据表明, 该化合物可能引起皮肤和眼睛刺激, 操作时应避免直接接

触。废弃物处置需符合当地环保法规，不可随意排放。详细毒理学数据参考 SDS 第 11 节（急性毒性：LD50 大鼠经口>2000 mg/kg）。

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条件进一步优化。