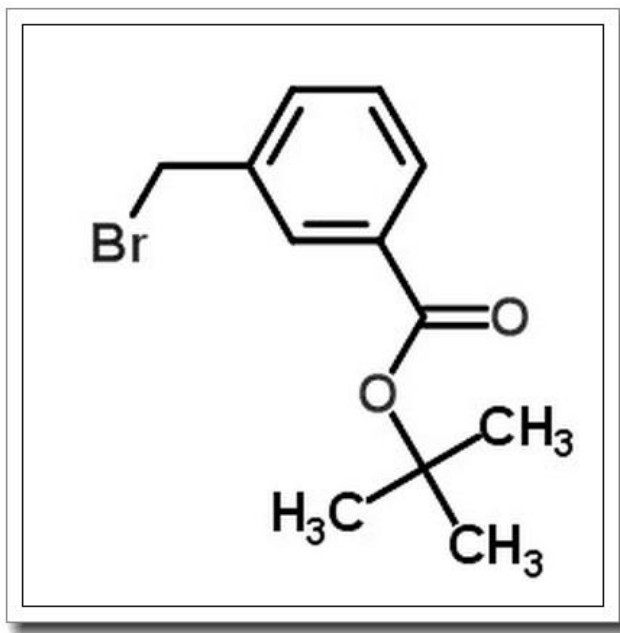


3-溴甲基苯甲酸叔丁酯

tert-butyl 3-(bromomethyl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-(bromomethyl)benzoate
中文名称	3-溴甲基苯甲酸叔丁酯
CAS 号	126062-63-3
分子式	C ₁₂ H ₁₅ BrO ₂
分子量	271.15
纯度	>96%

产品说明

3-溴甲基苯甲酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴甲基苯甲酸叔丁酯 (tert-butyl 3-(bromomethyl)benzoate) 是一种重要的有机合成中间体，化学式为 $C_{12}H_{15}BrO_2$ ，分子量为 271.15。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，CAS 号为 126062-63-3，纯度通常高于 96%。其结构中的溴甲基和叔丁酯基团赋予其较高的反应活性，尤其在亲核取代反应和酯交换反应中表现突出。该化合物易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳基溴化物衍生物，3-溴甲基苯甲酸叔丁酯在生物化学领域主要用于构建复杂分子骨架。其溴甲基可作为活性位点参与碳-碳键或碳-杂原子键的形成，而叔丁酯基团则提供保护羧基的功能，在肽类化合物和药物分子的合成中具有关键作用。该试剂的引入可显著提高合成路线的效率与选择性，是医药研发和材料科学中不可或缺的砌块分子。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于以下领域：医药中间体合成，特别是抗肿瘤和抗病毒药物的结构修饰；高分子材料改性，如作为交联剂或功能单体；有机光电材料的制备，用于构建共轭体系或电子传输单元。具体用途包括但不限于：通过 Suzuki 偶联反应制备联芳烃衍生物，或经水解反应生成 3-羧甲基苯甲酸类化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存，开封后需充惰性气体保护以延长保质期。使用时应佩戴防护手套和护目镜，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。反应操作需在通风橱中进行，因其可能释放刺激性气体。溶解推荐使用无水级有机溶剂，并严格避免水分引入以防止酯基水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 双重验证，确保溴代物残留量低于 0.5%。安全数据表明，

该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性，CAS 号为 126062-63-3 的 GHS 分类包含 H315-H319-H335。泄漏处理需用惰性吸附材料收集，并按危险废弃物规范处置。运输时需符合 UN3077 标准，包装类别为 III。

注：本说明基于当前研究数据编制，实际应用前请查阅最新版物质安全数据表（MSDS）并执行风险评估。