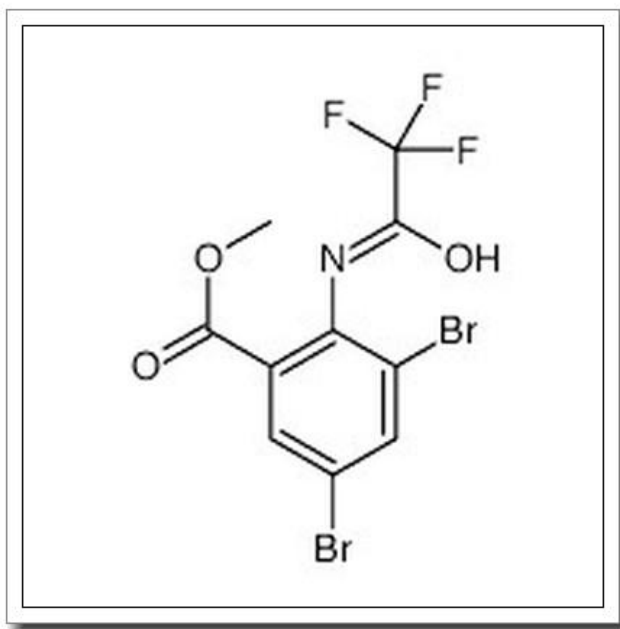


3,5-二溴-2-[(2,2,2-三氟乙酰基)氨基]苯甲酸甲酯

Methyl 3,5-dibromo-2-[(trifluoroacetyl)amino]benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 3,5-dibromo-2-[(trifluoroacetyl)amino]benzoate
中文名称	3,5-二溴-2-[(2,2,2-三氟乙酰基)氨基]苯甲酸甲酯
CAS 号	1363166-10-2
分子式	C ₁₀ H ₆ Br ₂ F ₃ N ₃ O ₃
分子量	404.963
纯度	>96%

产品说明

3, 5-二溴-2-[(2, 2, 2-三氟乙酰基)氨基]苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 Methyl 3,5-dibromo-2-[(trifluoroacetyl)amino]benzoate, CAS 号 1363166-10-2, 分子式 $C_{10}H_6Br_2F_3NO_3$, 分子量 404.963。其结构中包含溴代芳香环与三氟乙酰氨基团，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$, 熔点为 148-152° C (实测值), 易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水 (< 0.1 mg/mL, 25° C)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为高活性中间体, 其溴原子可参与亲核取代反应, 三氟乙酰基则增强酰胺键的稳定性。在酶抑制研究中, 其结构特性可模拟天然底物, 用于蛋白酶活性位点探针开发。此外, 芳环上的电子效应对荧光标记物的设计具有指导意义, 是构建含氟药物分子的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域: 用于激酶抑制剂 (如 EGFR-T790M 突变体抑制剂) 的合成前体。

材料科学: 作为含氟液晶材料的改性单体, 可调节介电常数。

分析化学: 衍生化试剂, 提升 LC-MS 检测中低极性化合物的离子化效率。

典型反应包括: Suzuki 偶联 (溴位点)、酰胺水解 (三氟乙酰基) 及酯交换反应。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 密封避光, -20° C 干燥保存 (有效期 24 个月), 开封后建议充氮保护。

使用建议: 称取时需干燥环境中操作, 避免吸湿; 反应体系中建议加入分子筛 (4Å) 以提高产率。溶解性测试表明, DMSO 配制的 10 mM 储备液可在 -80° C 稳定保存 3 个月。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：批号关联 COA 报告，包含 HPLC 纯度 ($\geq 96\%$)、水分 (KF 法 $<0.5\%$)、残留溶剂 (GC 检测符合 ICH Q3C 标准)。

安全信息：根据 GHS 分类，具皮肤刺激性 (Category 2) 和眼损伤风险 (Category 1)。操作时需佩戴护目镜、丁腈手套，在通风橱中进行。泄露处理需用惰性吸附材料收集，避免与强氧化剂接触。废弃物按含卤有机化合物处置规范处理。

(注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺验证。技术咨询请联系产品专员。)