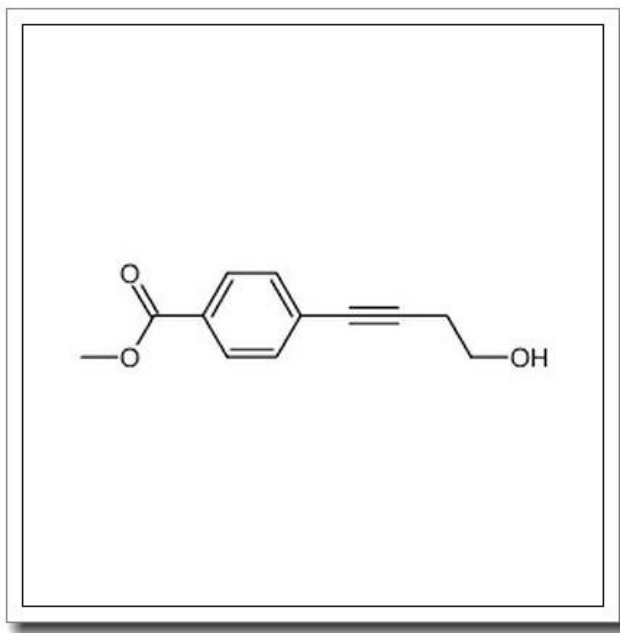


# 培美曲塞二钠中间体

*4-(4-hydroxy-1-butynyl)benzoic acid methyl ester*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(4-hydroxy-1-butynyl)benzoic acid methyl ester
中文名称	培美曲塞二钠中间体
CAS 号	123910-86-1
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>
分子量	204.222
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-(4-hydroxy-1-butynyl)benzoic acid methyl ester 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 4-(4-羟基-1-丁炔基)苯甲酸甲酯，是合成抗肿瘤药物培美曲塞二钠的关键中间体。其 CAS 号为 123910-86-1，分子式 C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>O<sub>3</sub>，分子量 204.222。该化合物含有炔基和酯基官能团，在常温下稳定，易溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水。经 HPLC 检测，产品纯度大于 96%，符合医药中间体的质量标准要求。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为培美曲塞二钠的合成前体，该中间体通过后续的官能团转化可形成药物分子的核心结构。其分子中的炔基具有高反应活性，能够参与多种偶联反应，而酯基则可通过水解转化为羧酸基团。这些特性使其成为构建多靶点抗叶酸制剂的重要砌块，在抑制肿瘤细胞 DNA 合成过程中发挥关键作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品专用于抗肿瘤药物培美曲塞二钠的工业化生产。在合成工艺中，通常作为第三或第四步反应的起始物料，通过催化加氢、水解等步骤转化为后续中间体。此外，在药物研发领域，该化合物还可用于结构修饰研究，开发新型抗代谢类抗肿瘤药物。使用时应严格控制反应条件，避免炔基的过度还原或酯基的过早水解。

#### 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，长期储存需充氮气保护。开封后应尽快使用完毕，剩余物料需重新密封并标注开封日期。使用前需进行干燥处理，建议在惰性气体保护下进行反应操作。工作环境应配备防爆通风设备，避免与强氧化剂接触。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 GC-MS 和 NMR 进行结构确证，HPLC 检测纯度并控制相关杂质含量。根据 MSDS 显示，该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护眼镜和丁腈手

套。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范进行处置，禁止直接排入下水道。