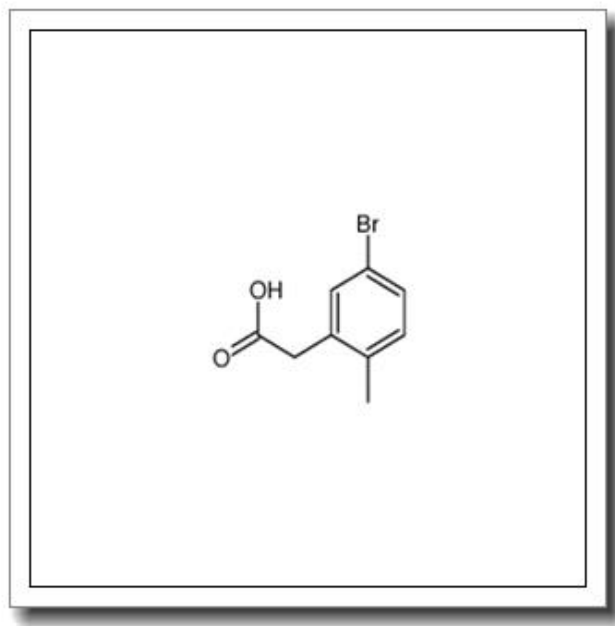


# 2-(5-溴-2-甲基苯基)乙酸

*2-(5-Bromo-2-methylphenyl)acetic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(5-Bromo-2-methylphenyl)acetic acid
中文名称	2-(5-溴-2-甲基苯基)乙酸
CAS 号	854646-94-9
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> BrO <sub>2</sub>
分子量	229.071
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-(5-溴-2-甲基苯基)乙酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-(5-Bromo-2-methylphenyl)acetic acid (CAS 号: 854646-94-9) 是一种有机溴化合物, 分子式为  $C_9H_9BrO_2$ , 分子量 229.071。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有典型的芳基乙酸结构特征。其化学结构中包含溴原子和甲基取代基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在有机合成中表现出较高的反应选择性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯乙酸衍生物, 该化合物可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应, 同时溴原子可作为活性位点用于偶联反应 (如 Suzuki 偶联)。其在药物化学中常用于构建非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的中间体, 或作为酶抑制剂设计的核心骨架。溴原子的引入可增强分子脂溶性, 影响其细胞膜穿透性和靶标结合能力。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 医药研发: 用于合成抗炎、抗肿瘤化合物的关键中间体。
- 材料科学: 作为有机光电材料的修饰基团, 调节材料能级结构。
- 学术研究: 在金属催化偶联反应中作为标准化合物或配体前体。

典型用途包括: 通过羧基活化制备酰胺衍生物, 或通过溴原子参与钯催化交叉偶联反应扩展分子结构。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度  $2-8^{\circ}C$ 。长期保存需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明易溶于二甲基亚砷 (DMSO)、甲醇, 微溶于水, 建议根据实验需求选择适当溶剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 重金属含量  $< 10ppm$ 。安全数据:

- GHS 分类: 皮肤刺激 (Category 2)、眼睛刺激 (Category 2A)
- 防护措施: 佩戴护目镜、防化手套, 接触后立即用大量清水冲洗。
- 废弃物处理: 按危险化学品规范处置, 不可直接排入下水道。

注: 具体实验方案建议参考文献报道或进行小规模预实验验证。本说明基于现有研究数据, 实际应用可能需进一步优化条件。