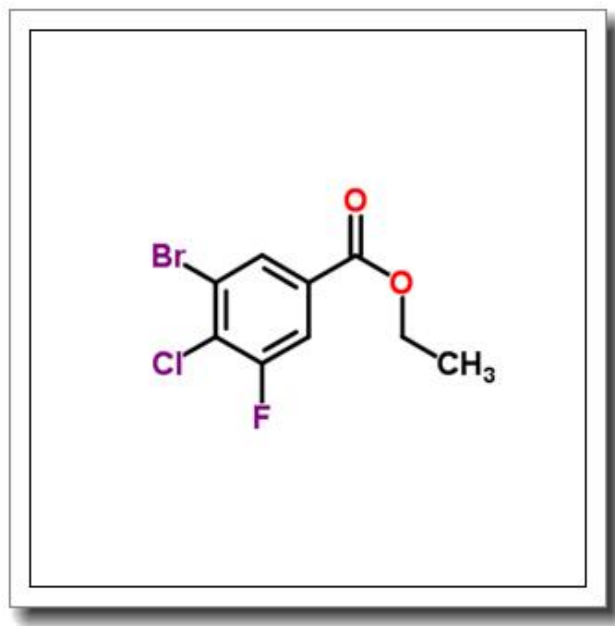


3-溴-4-氯-5-氟苯甲酸乙酯

Ethyl 3-bromo-4-chloro-5-fluorobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 3-bromo-4-chloro-5-fluorobenzoate
中文名称	3-溴-4-氯-5-氟苯甲酸乙酯
CAS 号	1160574-71-9
分子式	C ₉ H ₇ BrClF ₀₂
分子量	281.506
纯度	≥96%

产品说明

3-溴-4-氯-5-氟苯甲酸乙酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-溴-4-氯-5-氟苯甲酸乙酯 (Ethyl 3-bromo-4-chloro-5-fluorobenzoate, CAS 号: 1160574-71-9) 是一种多卤代苯甲酸酯类化合物, 分子式为 $C_9H_7BrClF_2$, 分子量为 281.506。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有较高的化学稳定性。其结构中的溴、氯和氟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优异的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为多卤代芳香族化合物, 3-溴-4-氯-5-氟苯甲酸乙酯在药物化学和材料科学中具有重要价值。其结构中的卤素原子可作为活性位点参与偶联反应、亲核取代反应等, 是合成复杂有机分子 (如药物中间体、液晶材料) 的关键砌块。此外, 其氟原子引入可增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 在药物设计中常用于优化药代动力学性质。

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: 用于合成抗肿瘤、抗感染等药物的活性分子骨架。
- 农药化学: 作为高效农药 (如除草剂、杀菌剂) 的合成前体。
- 材料科学: 参与制备含卤素的功能性高分子材料或液晶化合物。
- 科研用途: 在有机方法学研究中作为模板底物, 开发新型催化反应。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中, 密封保存于 $2-8^{\circ}\text{C}$ 的惰性气体 (如氮气) 保护下, 避免光照和潮湿。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, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质检报告 (COA)。安全信息如

下:

- 危险标识: 可能引起皮肤刺激 (H315) 和眼睛刺激 (H319)。
- 防护措施: 操作时佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩, 避免与强氧化剂接触。
- 废弃物处理: 按危险化学品规范处置, 不可直接排入环境。

如需进一步技术数据或定制服务, 请联系我们的技术支持团队。