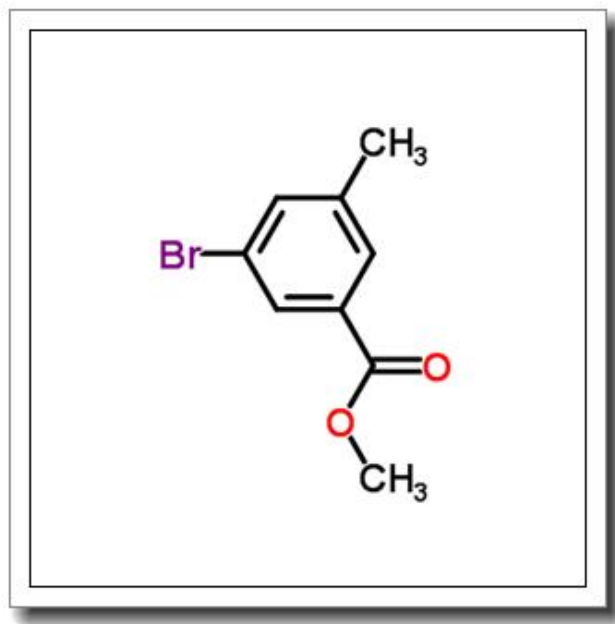


3-溴-5-甲基苯甲酸甲酯

3-Bromo-5-Methyl-Benzoic Acid Methyl Ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Bromo-5-Methyl-Benzoic Acid Methyl Ester
中文名称	3-溴-5-甲基苯甲酸甲酯
CAS 号	478375-40-5
分子式	C ₉ H ₉ BrO ₂
分子量	229.071
纯度	≥96%

产品说明

3-溴-5-甲基苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-5-甲基苯甲酸甲酯 (3-Bromo-5-Methyl-Benzoic Acid Methyl Ester) 是一种有机溴化物, 化学式为 $C_9H_9BrO_2$, 分子量为 229.071。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, CAS 号为 478375-40-5, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中的溴原子和酯基赋予其较高的反应活性, 可作为有机合成中的重要中间体。该化合物在常温下稳定, 但需避免强氧化剂和强酸强碱环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳香族溴代化合物, 3-溴-5-甲基苯甲酸甲酯在生物化学领域主要用于构建复杂分子骨架。其溴原子可通过偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 引入其他官能团, 而酯基可进一步水解或还原, 为药物分子和功能材料的合成提供关键前体。该化合物在医药研发中常用于抗菌、抗肿瘤活性分子的结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品是合成非甾体抗炎药和激酶抑制剂的重要中间体。在材料科学中, 可用于制备液晶材料和有机电致发光材料。此外, 在农药化学中, 其衍生物可作为杀菌剂或杀虫剂的活性成分。实验室中常将其用于钯催化交叉偶联反应的模板底物。

4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于 $2-8^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长保质期。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, 本品易溶于二氯甲烷、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 $\geq 96\%$, 重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表 (SDS) 显示其为刺激性物质, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。若接触眼睛, 应立即用大

量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。运输分类为 UN 3077, 属第 9 类杂项危险品。

注: 以上信息基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验。