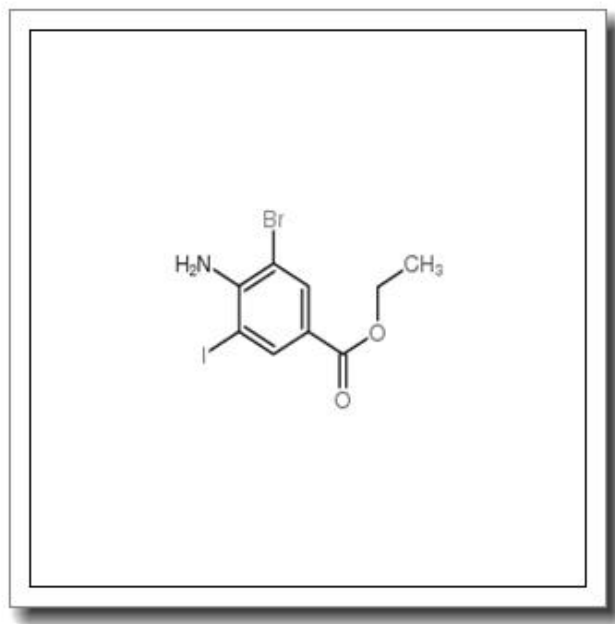


4-氨基-3-溴-5-碘苯甲酸乙酯

ethyl 4-amino-3-bromo-5-iodobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-amino-3-bromo-5-iodobenzoate
中文名称	4-氨基-3-溴-5-碘苯甲酸乙酯
CAS 号	437707-51-2
分子式	C ₉ H ₉ BrIN ₂ O ₂
分子量	369.982
纯度	≥96%

产品说明

4-氨基-3-溴-5-碘苯甲酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 ethyl 4-amino-3-bromo-5-iodobenzoate (CAS 号: 437707-51-2), 是一种含卤素取代基的芳香族化合物。其分子式为 $C_9H_9BrIN_2$, 分子量为 369.982, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, 具有苯甲酸酯的基本结构, 同时含有氨基、溴和碘三种功能性取代基, 赋予其独特的反应活性和分子识别特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为多官能团化合物, 其氨基可参与缩合或重氮化反应, 溴和碘原子可通过金属催化偶联反应 (如 Suzuki 或 Ullmann 反应) 构建复杂分子骨架。在生物化学领域, 该结构可作为荧光探针或药物中间体的关键合成模块, 尤其适用于靶向性分子设计。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 是合成抗癌、抗炎化合物的重要前体; 在材料科学中, 可用于制备含卤素功能团的高分子材料。具体应用包括但不限于:

- 作为 PD-1/PD-L1 抑制剂类药物的中间体
- 构建用于生物成像的碘标记分子探针
- 开发新型液晶材料的功能性单体

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下密封保存, 有效期 24 个月。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性较差。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 验证结构。安全数据表明:

- 危险代码: H302-H315-H319 (吞咽有害, 皮肤刺激, 眼睛刺激)
- 防护措施: 佩戴防护手套/眼镜, 在通风橱中操作
- 废弃物处理: 按有害化学品规范处置

注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件进一步验证。更多技术参数可索取 COA 报告。