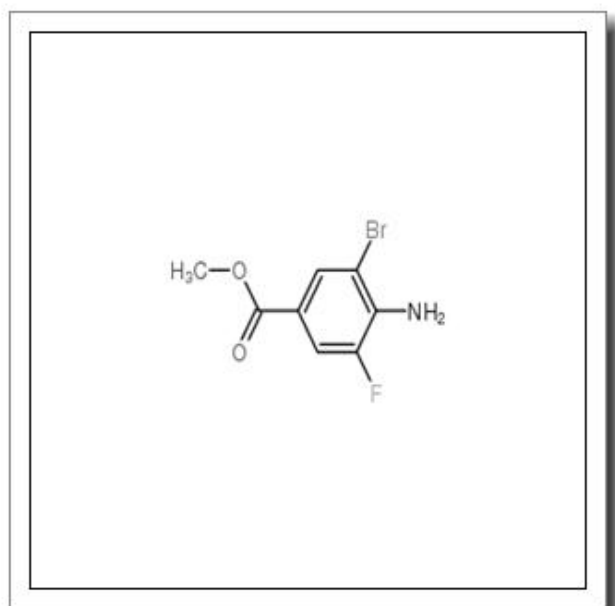


# Methyl 4-amino-3-bromo-5-fluorobenzoate

*Methyl 4-amino-3-bromo-5-fluorobenzoate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-amino-3-bromo-5-fluorobenzoate
中文名称	Methyl 4-amino-3-bromo-5-fluorobenzoate
CAS 号	1123171-91-4
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> BrFN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	248.049
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

Methyl 4-amino-3-bromo-5-fluorobenzoate (CAS 号: 1123171-91-4) 是一种重要的芳香族化合物, 分子式为  $C_8H_7BrFN_2O_2$ , 分子量为 248.049。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构中的氨基、溴和氟取代基使其具有独特的反应活性, 可作为有机合成中的关键中间体。该化合物在极性有机溶剂中具有良好的溶解性, 如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO), 但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为一种多功能中间体, Methyl 4-amino-3-bromo-5-fluorobenzoate 在药物化学和材料科学中具有重要价值。其分子中的溴原子可作为亲电取代反应的位点, 而氨基和氟原子的存在使其成为构建复杂杂环化合物 (如喹啉类和苯并噻唑类衍生物) 的理想前体。此外, 氟原子的引入常能增强化合物的代谢稳定性和生物膜穿透性, 因此在药物设计中备受关注。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发领域, 特别是在抗肿瘤、抗感染和中枢神经系统药物的合成中。具体用途包括但不限于: 作为激酶抑制剂的关键片段、用于构建 PET 显影剂的放射性标记前体、以及作为农药中间体。在材料科学中, 它可用于合成具有特殊光电性能的有机功能材料。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于密闭容器中, 在  $-20^{\circ}C$  下避光保存, 长期储存需充入惰性气体保护。使用时应佩戴适当的个人防护装备 (如手套、护目镜和实验服), 并在通风良好的化学通风橱中操作。开封后建议尽快使用, 避免反复冻融。溶解时建议先使用少量有机溶剂预溶, 再逐步稀释至所需浓度。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间稳定性。安全信息方

面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时应避免直接接触。如发生接触，应立即用大量清水冲洗并寻求医疗帮助。废弃物处理需符合当地化学品处置法规，不可直接排入下水道。建议在干燥、阴凉处储存，远离氧化剂和强酸强碱。