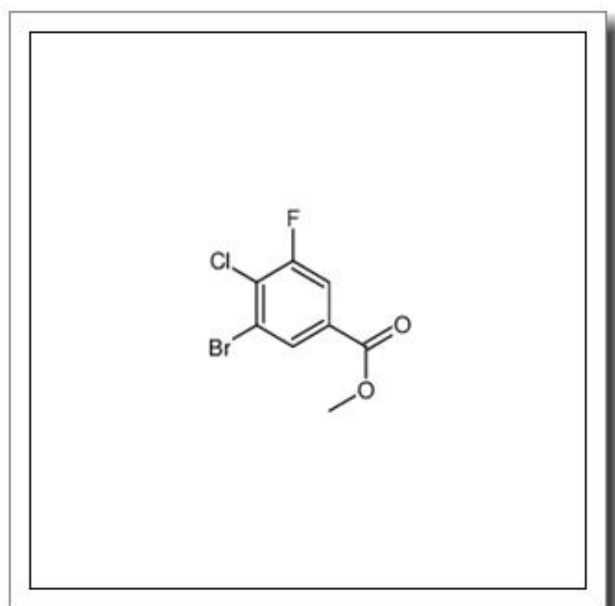


# methyl 3-bromo-4-chloro-5-fluorobenzoate

*methyl 3-bromo-4-chloro-5-fluorobenzoate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-bromo-4-chloro-5-fluorobenzoate
中文名称	methyl 3-bromo-4-chloro-5-fluorobenzoate
CAS 号	1160574-62-8
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> BrClF <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	267.48
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

甲基 3-溴-4-氯-5-氟苯甲酸酯 (methyl 3-bromo-4-chloro-5-fluorobenzoate) 是一种多卤代苯甲酸酯类化合物, CAS 号为 1160574-62-8, 分子式为  $C_8H_5BrClF_2$ , 分子量为 267.48。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度不低于 96%。其结构中含有溴、氯和氟三种卤素取代基, 具有较高的反应活性和稳定性, 适用于多种有机合成反应。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的有机合成中间体, 在药物化学和材料科学领域具有广泛的应用价值。其多卤代结构使其成为构建复杂分子骨架的关键模块, 尤其在含氟药物研发中, 氟原子的引入可显著改善化合物的生物活性和代谢稳定性。此外, 溴和氯原子的存在为后续的偶联反应或亲核取代反应提供了活性位点。

### 3. 主要应用领域与具体用途

甲基 3-溴-4-氯-5-氟苯甲酸酯主要用于医药中间体、农药合成以及功能材料开发。在医药领域, 它可用于合成抗肿瘤、抗病毒或抗菌药物的活性分子片段。在农药化学中, 该化合物可作为除草剂或杀虫剂的前体。此外, 其独特的卤代结构也使其在液晶材料或高分子材料的改性中具有潜在应用。

### 4. 储存条件与使用建议

该产品需密封保存于阴凉、干燥、通风良好的环境中, 避免光照和潮湿。推荐储存温度为 2-8°C, 长期保存建议充入惰性气体 (如氮气) 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, 该化合物易溶于二氯甲烷、丙酮等有机溶剂, 可根据实验需求选择合适的溶剂体系。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度  $\geq 96\%$ , 并提供完整的质检报告 (COA)。使用时需佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免与强氧化剂或强酸强碱接触。若不慎接触皮肤

或眼睛，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合文献和实际需求进行优化。