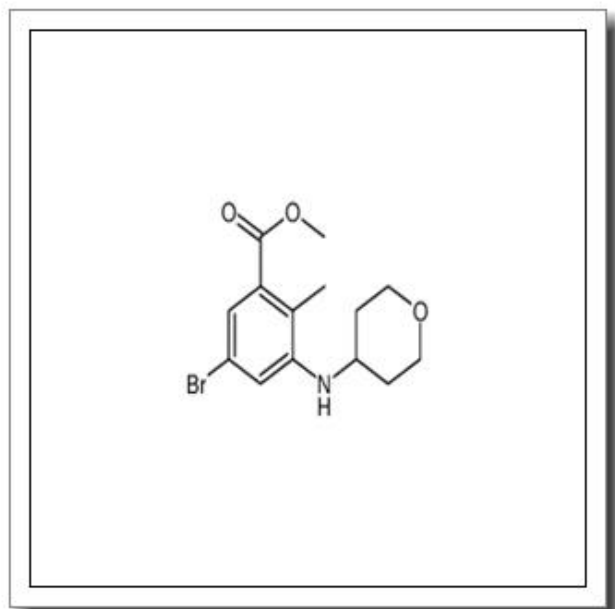


甲基 5-溴-2-甲基-3-((四氢-2H-吡喃-4-基)氨基)苯酸盐

Methyl 5-Bromo-2-Methyl-3-((Tetrahydro-2H-Pyran-4-Yl) Amino) Benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-Bromo-2-Methyl-3-((Tetrahydro-2H-Pyran-4-Yl) Amino) Benzoate
中文名称	甲基 5-溴-2-甲基-3-((四氢-2H-吡喃-4-基)氨基)苯酸盐
CAS 号	1403257-49-7
分子式	C ₁₄ H ₁₈ BrNO ₃
分子量	328.202
纯度	≥96%

产品说明

5-溴-2-甲基-3-((四氢-2H-吡喃-4-基)氨基)苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-溴-2-甲基-3-((四氢-2H-吡喃-4-基)氨基)苯甲酸甲酯，分子式为 $C_{14}H_{18}BrNO_3$ ，分子量 328.202，CAS 注册号 1403257-49-7。其结构包含溴代苯甲酸酯骨架与四氢吡喃氨基修饰基团，赋予分子良好的脂溶性和空间位阻效应。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，符合有机合成中间体的标准要求。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多功能合成砌块，其溴原子可参与偶联反应，酯基易于水解或转化，而四氢吡喃氨基则提供手性中心构建潜力。在药物化学中，此类结构常用于激酶抑制剂和 GPCR 调节剂的开发，特别是针对中枢神经系统靶点的先导化合物优化。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 作为抗肿瘤药物（如 PARP 抑制剂）的关键中间体
- 用于构建神经退行性疾病治疗药物的杂环骨架
- 在有机发光材料（OLED）前体合成中作为电子受体单元

实验室用途包括：

- Suzuki-Miyaura 偶联反应的底物
- 酯交换反应的模板化合物

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 惰性气体（氩气/氮气）保护的密闭容器中，避免光照和湿度。开封后建议分装使用，剩余物料需重新充惰性气体密封。溶解性测试显示易溶于 DMSO（ 50mg/mL ）、甲醇，微溶于水（ $<0.1\text{mg/mL}$ ）。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含:

- HPLC 纯度 (面积归一法) $\geq 96\%$
- 水分含量 (Karl Fischer) $\leq 0.5\%$
- 残留溶剂 (GC-MS) 符合 ICH Q3C 标准

安全警示:

- 危险代码 H302 (吞咽有害)
 - 防护措施 P280 (戴防护手套/护目镜)
 - 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗, 眼部接触需用生理盐水冲洗 15 分钟
- 废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地法规。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验验证。产品规格可能因批次调整, 请以随货质检报告为准。)