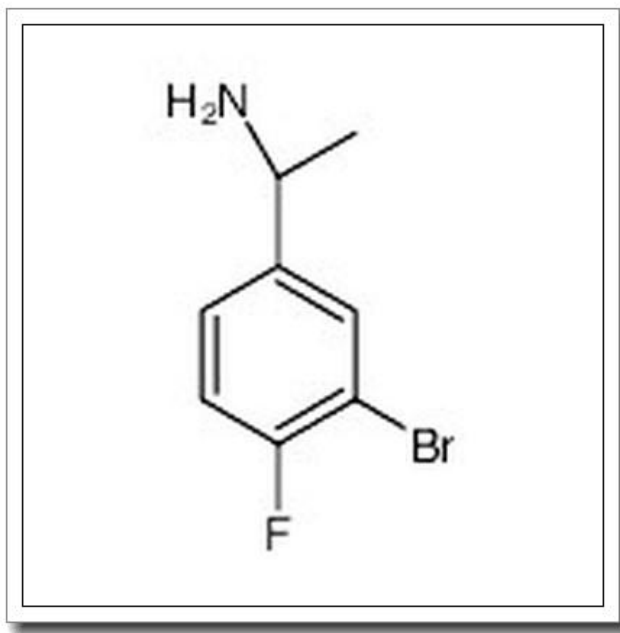


1-(3-溴-4-氟)-苯乙胺

(1S)-1-(3-Bromo-4-fluorophenyl)ethanamine



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1S)-1-(3-Bromo-4-fluorophenyl)ethanamine
中文名称	1-(3-溴-4-氟)-苯乙胺
CAS 号	1212376-96-9
分子式	C ₈ H ₉ BrFN
分子量	218.066
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(1S)-1-(3-溴-4-氟苯基)乙胺 (中文别名: 1-(3-溴-4-氟)-苯乙胺) 是一种手性芳香胺类化合物, 化学式为 C_8H_9BrFN , 分子量 218.066, CAS 注册号 1212376-96-9。该化合物以单一对映体形式存在 (S 构型), 常温下为白色至类白色结晶或粉末, 纯度标准 $\geq 96\%$ 。其结构特征为苯环上 3 位溴取代和 4 位氟取代的协同电子效应, 赋予分子独特的极性及空间位阻, 使其在不对称合成中表现出显著的手性诱导能力。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块, 该化合物可通过氨基的活性位点参与缩合、酰胺化等反应, 其溴原子可作为 Suzuki 偶联等交叉偶联反应的活性位点。氟原子的引入增强了代谢稳定性, 使其在药物化学中成为优化候选化合物药代动力学性质的关键结构单元。在生物活性研究中, 类似结构常见于神经调节剂、激酶抑制剂等靶向药物的核心骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域: 用于构建中枢神经系统药物 (如抗抑郁剂、多巴胺受体调节剂) 的中间体, 尤其适用于需要高立体选择性的合成路线。

材料科学: 作为有机发光二极管 (OLED) 材料的前驱体, 其卤素取代基可调节光电性能。

学术研究: 在不对称催化、金属有机化学等基础研究中作为手性配体的合成原料。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光密封保存于 $-20^{\circ}C$ 惰性气体 (如氩气) 环境中, 长期储存建议充氮保护。开封后需在干燥器内平衡至室温再使用, 避免吸湿。

使用建议: 实验操作应在通风橱中进行, 建议以无水有机溶剂 (如 DMF、THF) 溶解, 避免与强氧化剂接触。因对空气敏感, 推荐现配现用。

5. 质量控制与安全信息

质量控制: 通过 HPLC 测定化学纯度 ($\geq 96\%$), 手性纯度经手性柱分析确认 (ee

值 $\geq 99\%$)，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：根据 GHS 分类，该产品可能导致皮肤刺激（类别 2）和严重眼损伤（类别 1），操作时需佩戴护目镜及丁腈手套。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理法规。

注：本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗等人体应用。