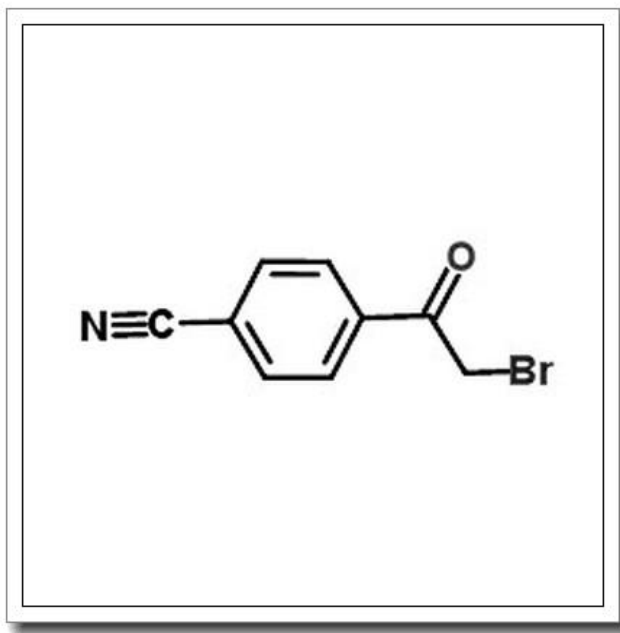


2-溴-4'-氰基苯乙酮

4-(2-bromoacetyl)benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(2-bromoacetyl)benzonitrile
中文名称	2-溴-4'-氰基苯乙酮
CAS 号	20099-89-2
分子式	C ₉ H ₆ BrN ₀
分子量	224.054
纯度	>96%

产品说明

4-(2-溴乙酰基)苯甲腈产品说明书

产品概述与化学特性

4-(2-溴乙酰基)苯甲腈 (化学名称: 4-(2-bromoacetyl)benzotrile, CAS 号: 20099-89-2) 是一种有机溴化物, 分子式为 C_9H_6BrNO , 分子量为 224.054。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 >96%, 具有显著的亲电反应活性。其结构中的溴乙酰基和氰基使其成为重要的合成中间体, 尤其在杂环化合物构建和药物分子修饰中表现突出。

生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为烷基化试剂, 通过溴原子的亲电取代反应与蛋白质、核酸或其他生物分子中的亲核位点 (如巯基、氨基) 结合。其氰基增强了分子极性, 提高了与生物靶标的结合特异性, 因此在酶抑制剂开发和活性分子标记中具有独特价值。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 用于激酶抑制剂、抗肿瘤先导化合物的结构修饰, 如 EGFR 抑制剂的关键中间体合成。
2. 材料科学: 作为液晶材料或高分子单体的前驱体, 参与共轭体系的构建。
3. 化学生物学: 用于蛋白质组学研究中的活性分子探针标记, 如半胱氨酸残基的特异性修饰。

储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体。使用时应在通风橱中操作, 避免与还原剂、强碱接触。溶解推荐使用 DMF 或丙酮等极性有机溶剂, 水溶液体系需现配现用以防水解。

质量控制与安全信息

通过 HPLC 确保纯度 >96%, 残留溶剂符合 USP 标准。本品具刺激性, 接触皮肤或眼

睛需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具，废弃物应作为有害化学废料处理。MSDS 资料备索。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。