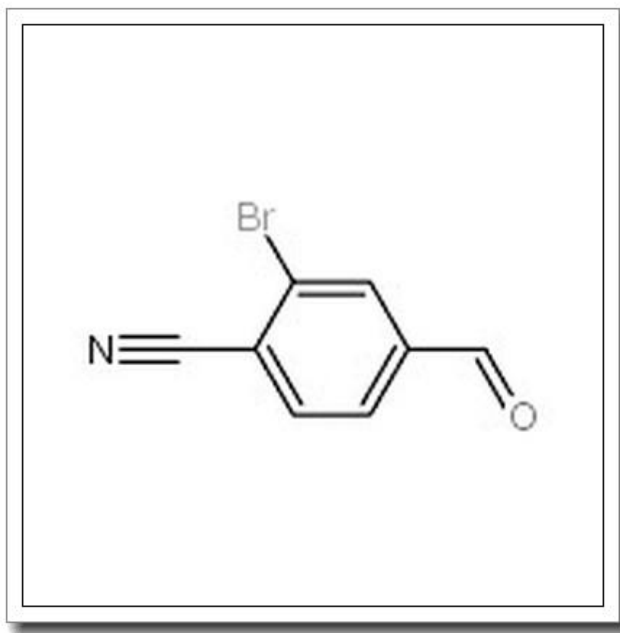


3-溴-4-氰基苯甲醛

2-bromo-4-formylbenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-bromo-4-formylbenzonitrile
中文名称	3-溴-4-氰基苯甲醛
CAS 号	89891-70-3
分子式	C ₈ H ₄ BrNO
分子量	210.027
纯度	>96%

产品说明

2-溴-4-甲酰基苯甲腈（3-溴-4-氰基苯甲醛）产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至淡黄色结晶性粉末，化学名 2-bromo-4-formylbenzotrile, CAS 号 89891-70-3, 分子式 C_8H_4BrNO , 分子量 210.027。纯度经 HPLC 检测 $\geq 96\%$, 具有苯甲醛衍生物的典型反应性, 其结构中溴原子与甲酰基、氰基的协同作用使其成为重要的有机合成中间体。易溶于二甲基亚砷 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为多官能团芳香族化合物, 本品可通过甲酰基参与缩合反应, 氰基作为电子受体参与亲核加成, 溴原子则提供卤代芳烃的偶联活性。这些特性使其在构建杂环化合物、药物活性分子及功能材料中具有关键作用, 尤其在抗肿瘤、抗炎药物先导化合物的结构修饰中表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

医药领域: 用于合成酪氨酸激酶抑制剂中间体及抗菌剂衍生物。

材料科学: 作为液晶材料、光电材料的合成砌块。

农药化学: 参与制备高效低毒杀虫剂的苯甲腈类衍生物。

实验室研究: 常用于 Suzuki 偶联、Vilsmeier-Haack 甲酰化等反应的条件优化研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭避光容器中, 建议温度 $2-8^{\circ}C$, 相对湿度 $\leq 60\%$ 。长期保存需充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。避免与强氧化剂、强酸强碱接触。溶解时建议优先选用无水 DMF 或 THF 溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包括熔点测定 (标准范围 $158-161^{\circ}C$)、HPLC 纯度分析及水分含量测试

($\leq 0.5\%$)。安全数据：急性毒性（口服大鼠 LD50） >500 mg/kg，皮肤刺激性类别 3。废弃物处置需符合危险化学品处理规范，建议通过专业机构进行焚化处理。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用需结合具体实验条件验证。）