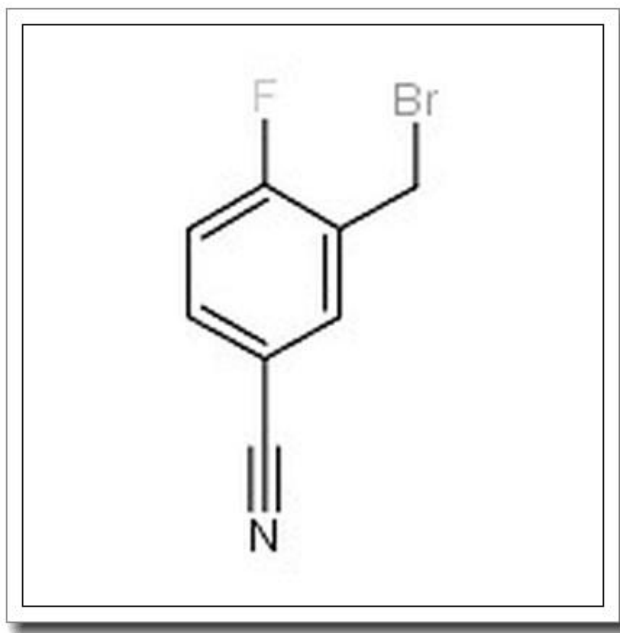


3-溴甲基-4-氟苯甲腈

3-(bromomethyl)-4-fluorobenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(bromomethyl)-4-fluorobenzonitrile
中文名称	3-溴甲基-4-氟苯甲腈
CAS 号	856935-35-8
分子式	C ₈ H ₅ BrFN
分子量	214.034
纯度	>96%

产品说明

3-溴甲基-4-氟苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴甲基-4-氟苯甲腈（化学名称：3-(bromomethyl)-4-fluorobenzonitrile）是一种重要的有机合成中间体，CAS 号为 856935-35-8，分子式为 C₈H₅BrFN，分子量为 214.034。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度通常高于 96%。其结构中的溴甲基和氟原子赋予其较高的反应活性，使其在亲核取代反应和偶联反应中具有广泛应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲腈类衍生物，3-溴甲基-4-氟苯甲腈在药物化学和材料科学中具有重要地位。其分子中的溴甲基可作为活性位点参与碳-碳键或碳-杂原子键的构建，而氟原子的引入能够调节化合物的电子效应和脂溶性，从而影响其生物活性和代谢稳定性。这类结构片段常见于抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的研发中。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体和有机合成领域。在药物研发中，它是构建含氟杂环化合物和芳基衍生物的关键原料，例如用于合成酪氨酸激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。此外，在材料科学中，可用于制备液晶材料或功能性高分子单体。其高反应性也使其成为交叉偶联反应（如 Suzuki 偶联）的理想底物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存，长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。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，该化合物易溶于二甲基亚砜（DMSO）和丙酮，微溶于水，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 ≥96%，并提供完整的质谱（MS）和核磁共振（NMR）谱图验证。安全数据表明，该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴

防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置，避免环境污染。

注：以上信息基于实验室测试数据，实际应用前请根据具体需求进行验证。