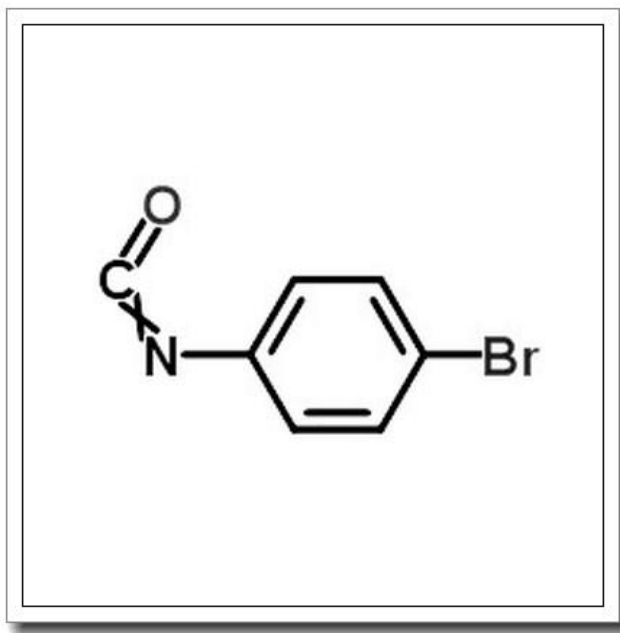


4-溴异氰酸苯酯

1-bromo-4-isocyanatobenzene



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 1-bromo-4-isocyanatobenzene |
| 中文名称 | 4-溴异氰酸苯酯 |
| CAS 号 | 2493-02-9 |
| 分子式 | C ₇ H ₄ BrN ₁ O ₁ |
| 分子量 | 198.017 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-溴异氰酸苯酯 (1-bromo-4-isocyanatobenzene) 是一种有机化合物，化学式为 C_7H_4BrNO ，分子量为 198.017，CAS 号为 2493-02-9。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体，具有显著的异氰酸酯基团 ($-N=C=O$) 活性，可与含活泼氢的化合物 (如醇、胺等) 发生反应。其结构中溴原子的引入增强了分子的反应多样性，使其成为有机合成中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

4-溴异氰酸苯酯在生物化学领域主要用于修饰生物分子或构建功能化材料。异氰酸酯基团的高反应性使其能够与蛋白质、多肽或核酸中的氨基、羟基等官能团结合，广泛应用于生物标记、药物载体设计及高分子材料合成。溴原子的存在进一步扩展了其应用范围，例如通过偶联反应引入其他功能基团。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物在医药、材料科学和有机合成中具有广泛用途。在医药领域，它可用于合成抗肿瘤或抗炎药物的中间体；在材料科学中，常用于制备聚氨酯、环氧树脂等高分子材料；在有机合成中，作为关键试剂参与 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应。此外，它还用于荧光探针的构建和生物共轭化学研究。

4. 储存条件与使用建议

4-溴异氰酸苯酯需在干燥、阴凉、通风良好的环境中储存，建议温度为 $2-8^{\circ}C$ ，避免与湿气接触。使用时应在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作，防止异氰酸酯基团水解。实验人员需佩戴防护手套、护目镜和防毒面具，并在通风橱中处理该试剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品纯度 $>96\%$ ，通过 HPLC 或 GC 分析确保质量。其安全信息需特别注意：该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，可能引起过敏反应。若不慎接触，应立即用大

量清水冲洗并就医。废弃处理需遵循当地法规，避免直接排放至环境中。运输时需贴有腐蚀性和刺激性标签，符合危险化学品运输规范。