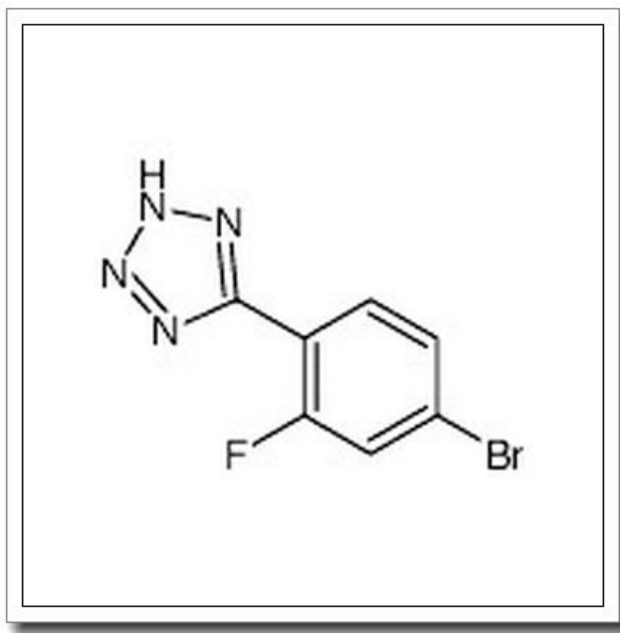


5-(4-溴-2-氟苯基)-2H-四唑

5-(4-Bromo-2-fluorophenyl)-1H-tetrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(4-Bromo-2-fluorophenyl)-1H-tetrazole
中文名称	5-(4-溴-2-氟苯基)-2H-四唑
CAS 号	530081-35-7
分子式	C ₇ H ₄ BrFN ₄
分子量	243.036
纯度	>96%

产品说明

5-(4-溴-2-氟苯基)-2H-四唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 5-(4-溴-2-氟苯基)-2H-四唑 (5-(4-Bromo-2-fluorophenyl)-1H-tetrazole)，CAS 号为 530081-35-7，分子式 $C_7H_4BrFN_4$ ，分子量 243.036。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 测定大于 96%，具有明确的化学结构和稳定的理化性质。该化合物属于四唑类衍生物，苯环上的溴和氟取代基赋予其独特的电子效应和空间位阻，使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

四唑类化合物因其模拟羧酸基团的特性，广泛应用于药物设计中的生物电子等排体替换。本产品的苯环修饰结构可增强与靶标蛋白的疏水相互作用，同时氟原子的引入可能改善代谢稳定性和膜穿透性。其在激酶抑制剂、抗菌剂和抗炎药物的先导化合物优化中表现出显著潜力，是构建杂环药物分子的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中，可作为构建块用于合成含四唑环的活性分子，例如血管紧张素 II 受体拮抗剂类似物。在材料科学中，可用于制备含氟光电材料的前体。具体实验用途包括：Suzuki 偶联反应的底物、点击化学的参与组分，以及金属有机框架 (MOF) 材料的配体修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体 (如氮气) 环境下长期储存。短期使用可存放于 $2-8^{\circ}C$ 密封容器中。使用时需在干燥环境下操作，避免接触强氧化剂或强酸。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)，微溶于甲醇，不溶于水，推荐使用无水溶剂进行配制。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振 (1H NMR、 ^{13}C NMR)、质谱 (MS) 和元素分析 (EA) 验证结

构，HPLC 检测残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中进行。如发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地危险化学品管理条例。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小规模预实验验证。）