

5-Bromo-2-fluoronicotinonitrile

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-2-fluoronicotinonitrile
产品目录号	
CAS 号	1256821-83-6
分子式	C ₆ H ₂ BrFN ₂
分子量	200.996
纯度	>96%

产品说明

5-溴-2-氟烟腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-氟烟腈 (5-Bromo-2-fluoronicotinonitrile) 是一种含卤素取代的烟腈类化合物，化学式为 $C_6H_2BrFN_2$ ，分子量 200.996，CAS 号为 1256821-83-6。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度高于 96%，具有显著的芳环亲电反应活性。其结构中溴原子和氟原子的引入增强了分子极性，使其成为有机合成中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为烟酸衍生物，5-溴-2-氟烟腈的腈基和卤素取代基使其能够参与多种偶联反应（如 Suzuki 偶联）和亲核取代反应。在药物化学领域，此类结构常作为构建杂环化合物的关键模块，尤其是用于抗病毒、抗肿瘤药物的先导物优化。其氟原子的引入可改善化合物的代谢稳定性和生物膜穿透性。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和精细化工合成。具体包括：

- 作为医药中间体，用于合成含氟吡啶类活性分子；
- 在农药化学中用于开发新型杀虫剂或杀菌剂；
- 在材料科学中可作为液晶材料或光电材料的修饰基团。实验室级应用需在通风橱中操作，避免直接接触。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性环境中，长期储存温度应低于 $-20^{\circ}C$ 。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具，避免吸入粉尘或皮肤接触。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO），微溶于甲醇，使用时需选择合适溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表明其具有刺

激性，可能引起皮肤和眼睛损伤（GHS 分类：H315-H319-H335）。操作时应遵守实验室化学品通用规范，废弃物需按危险化学品处置。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并通风稀释。

注：本说明仅限专业研究人员参考，具体实验方案需结合文献与安全评估制定。