

5-溴-1-(二氟甲基)吡啶-2(1H)-酮

5-Bromo-1-(difluoromethyl)pyridin-2(1H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-1-(difluoromethyl)pyridin-2(1H)-one
中文名称	5-溴-1-(二氟甲基)吡啶-2(1H)-酮
CAS 号	832735-61-2
分子式	C ₆ H ₄ BrF ₂ N ₁ O
分子量	224.003
纯度	>96%

产品说明

5-溴-1-(二氟甲基)吡啶-2(1H)-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-Bromo-1-(difluoromethyl)pyridin-2(1H)-one，CAS 号 832735-61-2，分子式 $C_6H_4BrF_2NO$ ，分子量 224.003。纯度经 HPLC 验证大于 96%，具有明确的吡啶酮骨架结构，溴原子与二氟甲基分别位于吡啶环的 5 位和 1 位，赋予其独特的电子效应和反应活性。该化合物在常温下稳定，易溶于极性有机溶剂如 DMSO、DMF，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物，其结构中的二氟甲基可显著增强分子的脂溶性和代谢稳定性，而溴原子则为后续偶联反应提供活性位点。这类衍生物在药物化学中常用于构建激酶抑制剂或抗菌剂的核心骨架，其吡啶酮结构能模拟生物体内嘌呤或嘧啶碱基的相互作用，具有潜在的生物活性调控功能。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药中间体合成，尤其用于开发抗肿瘤、抗病毒小分子药物。在有机合成中，可作为 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应的底物。此外，其含氟特性使其在材料科学中用于液晶材料或光电功能分子的修饰。具体用途需结合实验设计，推荐用量为 0.1-5mmol/L 反应体系。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需避光、密封，置于-20℃干燥环境中，避免与强氧化剂、酸碱物质接触。使用前建议恢复至室温并通氮气保护，以降低吸湿风险。溶解时优先选用无水 DMSO，配制溶液需现配现用。实验操作应在通风橱中进行，避免直接吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS)、核磁共振 (NMR) 及高效液相色谱 (HPLC) 三重验证，符合试剂级标准。安全数据表明，其对皮肤和眼睛有轻微刺激性，操作时需佩戴防护手

套及护目镜。若意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应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，具体应用需用户自行验证。更多技术参数可索取 COA 报告。