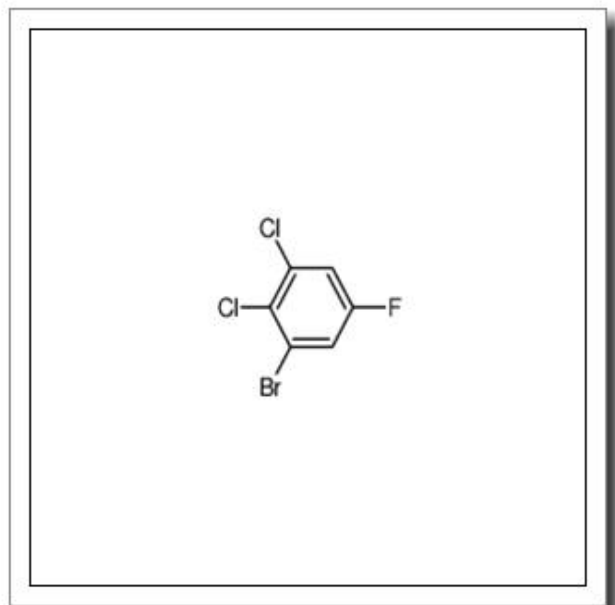


1-bromo-2,3-dichloro-5-fluorobenzene

1-bromo-2,3-dichloro-5-fluorobenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-bromo-2,3-dichloro-5-fluorobenzene
中文名称	1-bromo-2,3-dichloro-5-fluorobenzene
CAS 号	1000577-58-1
分子式	C ₆ H ₂ BrCl ₂ F
分子量	243.888
纯度	≥ 96%

产品说明

1-溴-2,3-二氯-5-氟苯产品说明书

产品概述与化学特性

1-溴-2,3-二氯-5-氟苯 (CAS 号: 1000577-58-1) 是一种多卤代芳香族化合物, 分子式为 $C_6H_2BrCl_2F$, 分子量 243.888。该化合物为白色至淡黄色结晶固体, 具有典型卤代苯的化学惰性特征。其结构中溴、氯、氟原子的协同作用赋予分子独特的电子效应和空间位阻, 纯度标准 $\geq 96\%$ (HPLC 测定), 主要杂质为同分异构体及微量卤代副产物。

生物化学功能与重要性

作为芳环多官能团化模板分子, 该化合物在药物化学中具有显著价值。氟原子的引入可调节脂溶性和生物利用度, 溴原子提供了后续偶联反应的活性位点, 而氯原子则增强分子刚性。这类结构单元常见于抗真菌剂和中枢神经系统药物研发, 特别适用于构建具有特定空间构效关系的先导化合物。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成含氟喹诺酮类抗生素及抗抑郁药物关键片段。
2. 材料科学: 作为液晶材料改性剂, 可调节介晶相温度范围。
3. 农用化学品: 参与制备高效低毒含氟杀虫剂的苯环骨架。
4. 科研领域: 在 ^{18}F 标记 PET 显影剂开发中作为前体化合物。

储存条件与使用建议

建议储存于惰性气体保护的密闭容器中, 温度维持在 $2-8^{\circ}C$ 避光保存。开封后需在干燥箱内操作, 防止吸湿分解。使用时应佩戴化学防护手套和护目镜, 反应条件推荐在无水无氧环境下进行, 避免与强氧化剂接触。运输时按危险化学品 B 类包装。

质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和 NMR 双重验证, 批次间纯度偏差 $\leq 1.5\%$ 。安全数据表明其急性毒性 LD_{50} (大鼠经口) 为 780 mg/kg, 属于有害物质 (H302)。操作时需在通风橱中

进行，皮肤接触后应立即用聚乙二醇 400 冲洗。废弃物处理需符合当地有机卤化物处置规范，建议采用高温焚烧法降解。