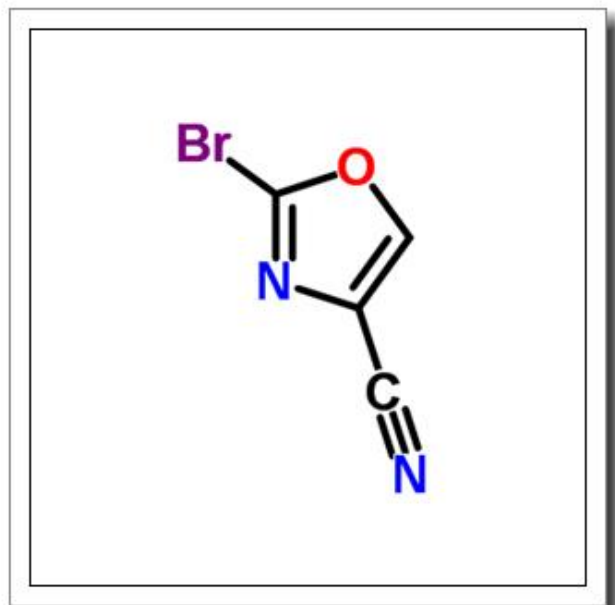


2-Bromo-1,3-oxazole-4-carbonitrile

2-Bromo-1,3-oxazole-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Bromo-1,3-oxazole-4-carbonitrile
中文名称	2-Bromo-1,3-oxazole-4-carbonitrile
CAS 号	1240608-82-5
分子式	C ₄ HBrN ₂ O
分子量	172.967
纯度	≥96%

产品说明

2-溴-1,3-噁唑-4-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-溴-1,3-噁唑-4-甲腈 (CAS 号: 1240608-82-5) 是一种含溴杂环化合物, 分子式为 C_4HBrN_2O , 分子量 172.967。该化合物以白色至淡黄色结晶或粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有噁唑环骨架结构, 兼具溴原子的高反应性和氰基的电子亲和性, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。其熔点和沸点数据需通过实验测定, 易溶于极性有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和乙腈。

2. 生物化学功能与重要性

作为噁唑类衍生物, 该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其溴原子可参与亲核取代反应, 氰基则能转化为羧酸、酰胺等官能团, 在药物化学中广泛用于激酶抑制剂和抗菌剂的合成。此外, 噁唑环结构常见于天然产物和药物分子 (如抗病毒药和抗肿瘤剂), 赋予其显著的药物开发潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品常用于以下方向: 一是作为片段分子用于高通量筛选库, 优化先导化合物的活性; 二是参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 构建多环体系。在材料科学中, 可用作有机发光二极管 (OLED) 的电子传输材料前体。农业化学领域则探索其作为新型杀虫剂中间体的可能性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 于通风橱中操作。避免与强氧化剂、强酸强碱接触, 防止释放有毒气体 (如 HBr 或 HCN)。溶解推荐使用无水级溶剂以减少副反应。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 批次报告提供详细色谱数据。根据 GHS 分类, 该物质可能导致皮肤刺激 (类别 2) 和严重眼损伤 (类别 1), 操作时需符合 OSHA 实验室

安全规范。废弃物应作为有害化学废料处置，严禁直接排放。急救措施包括：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗，吸入后转移至空气新鲜处并就医。

（注：具体物化参数如溶解度、光谱数据等可根据客户需求另行提供。）