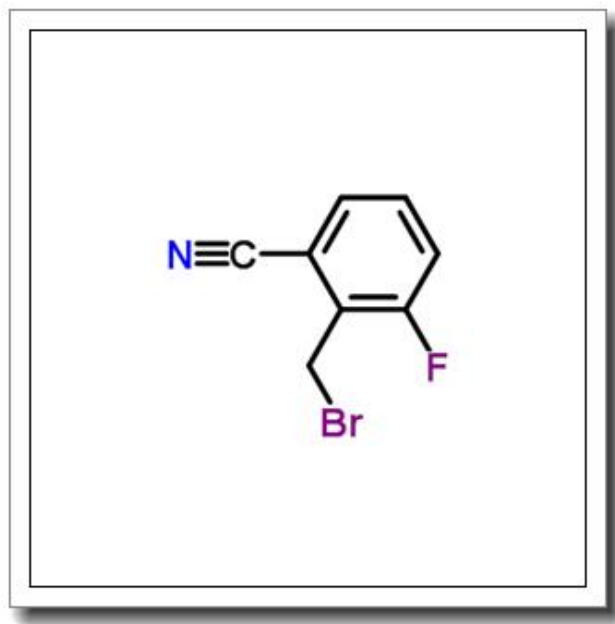


2-氰基-6-氟溴苄

2-(Bromomethyl)-3-fluorobenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(Bromomethyl)-3-fluorobenzonitrile
中文名称	2-氰基-6-氟溴苄
CAS 号	635723-84-1
分子式	C ₈ H ₅ BrFN
分子量	214.034
纯度	≥96%

产品说明

2-(Bromomethyl)-3-fluorobenzonitrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(Bromomethyl)-3-fluorobenzonitrile (CAS 号: 635723-84-1) 是一种含氟芳香族溴化物, 分子式为 C_8H_5BrFN , 分子量 214.034。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 其结构中的溴甲基和氰基赋予其高反应活性, 而氟原子的引入增强了其脂溶性和生物活性。该物质易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙腈, 微溶于水, 需避光保存以避免光解反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为有机合成中间体, 该化合物的溴甲基可作为亲电试剂参与取代反应, 氰基则能进一步转化为羧酸、酰胺等官能团。氟原子的存在使其在药物化学中具有特殊价值, 能调节分子的代谢稳定性和靶标亲和力。其在构建含氟杂环化合物及生物活性分子中表现出关键作用, 尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物研发中应用广泛。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和农药中间体合成, 具体包括:

- 抗肿瘤药物前体: 如用于蛋白激酶抑制剂的氟代苯环结构构建。
- 农药活性分子修饰: 通过溴甲基化反应引入烷基链以增强杀虫活性。
- 材料科学: 作为含氟液晶材料的合成原料。
- 科研用途: 用于研究氟代芳烃的亲核取代反应机制。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于干燥、避光、 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 环境下, 避免与氧化剂、强酸强碱接触。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 确保通风良好。开封后建议一次性使用完毕, 或充氩保存以减少降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 其具刺激

性，可能引起皮肤、眼睛及呼吸道损伤。操作时应遵守 GHS 分类：H302（吞咽有害）、H315（皮肤刺激）、H319（严重眼刺激）。泄漏处理需用惰性吸附材料收集，废弃时按危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）