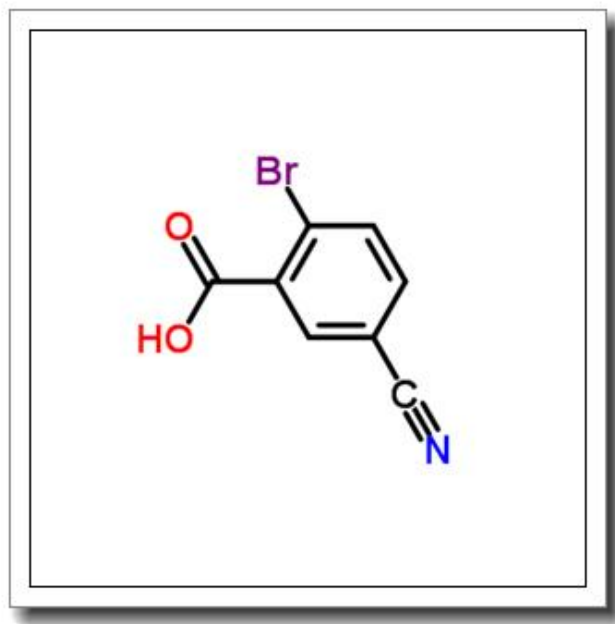


2-溴-5-氰基苯甲酸

2-Bromo-5-cyanobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Bromo-5-cyanobenzoic acid
中文名称	2-溴-5-氰基苯甲酸
CAS 号	845616-12-8
分子式	C ₈ H ₄ BrN ₂ O ₂
分子量	226.027
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-溴-5-氰基苯甲酸 (2-Bromo-5-cyanobenzoic acid) 是一种有机芳香化合物，化学式为 $C_8H_4BrNO_2$ ，分子量为 226.027，CAS 号为 845616-12-8。该化合物由苯甲酸骨架修饰而成，在 2 号位引入溴原子，5 号位引入氰基，兼具卤代芳烃和氰基芳烃的特性。其纯度为 $\geq 96\%$ ，常温下为白色至类白色结晶或粉末，微溶于水，易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO)。

2. 生物化学功能与重要性

2-溴-5-氰基苯甲酸是一种重要的医药中间体和有机合成砌块。氰基和溴原子的引入使其具有较高的反应活性，可作为 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应的底物。此外，其苯甲酸结构易于衍生化，在药物分子设计中常用于构建活性片段或修饰药物骨架，尤其在抗肿瘤、抗炎等小分子药物的研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中，它可用于合成酪氨酸激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的中间体；在农药领域，可作为除草剂或杀菌剂的合成前体；在材料科学中，可用于制备功能化高分子或液晶材料。此外，它也常用于学术研究中的有机合成方法学开发。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存，长期储存需充入惰性气体（如氮气）保护。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议选用极性有机溶剂，并通过加热或超声辅助溶解。反应后需妥善处理废液，遵守实验室安全规范。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供 COA（质量分析证书）。其危害性包括刺激性（皮肤、眼睛）和潜在毒性（氰基释放风险），操作时需佩戴防护手套、护

目镜和防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。运输时需按危险化学品标准包装，避免与强氧化剂混放。

(全文共计 436 字)