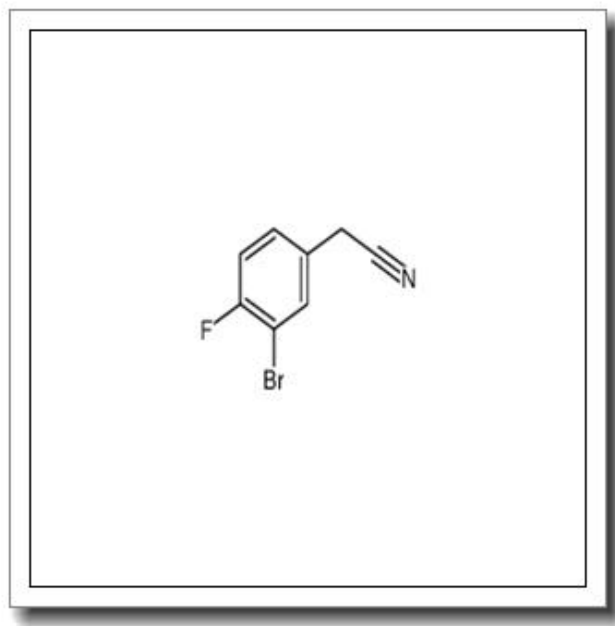


3-溴-4-氟苯乙腈

2-(3-Bromo-4-fluorophenyl)acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3-Bromo-4-fluorophenyl)acetonitrile
中文名称	3-溴-4-氟苯乙腈
CAS 号	501420-63-9
分子式	C ₈ H ₅ BrFN
分子量	214.034
纯度	≥96%

产品说明

3-溴-4-氟苯乙腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-4-氟苯乙腈 (2-(3-Bromo-4-fluorophenyl)acetonitrile) 是一种含卤芳香族乙腈衍生物, 化学式为 C_8H_5BrFN , 分子量 214.034, CAS 号为 501420-63-9。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的腈类特征吸收峰 (红外光谱 2250 cm^{-1} 附近)。其结构中溴原子和氟原子的引入显著增强了分子的电子效应和反应活性, 使其成为有机合成中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯乙腈类衍生物, 其氰基 ($-CN$) 可进一步转化为羧酸、酰胺或胺类官能团, 而溴原子和氟原子则为亲核取代反应 (如 Suzuki 偶联) 或定位修饰提供了关键位点。在药物化学中, 氟原子的引入常用于改善化合物的代谢稳定性和膜穿透性, 溴原子则常用于后续交叉偶联反应, 因此该分子在活性分子结构改造中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体、农药合成及材料科学领域。在医药研发中, 可用于构建含氟靶向药物分子 (如激酶抑制剂); 在农药领域, 可作为杀菌剂或除草剂的关键前体; 在材料科学中, 可用于合成液晶材料或光电功能分子。其具体应用案例包括但不限于抗肿瘤化合物库的构建及含氟聚合物的单体合成。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 $2-8^{\circ}\text{C}$ 冷藏保存。长期储存需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、丙酮, 微溶于乙醇, 不溶于水。反应建议在水条件下进行, 以防氰基水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10\text{ ppm}$ 。安全数据: 急性毒性 (口服

大鼠 LD50) >500 mg/kg, 对眼睛和皮肤有刺激性。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

(注: 本说明基于现有实验数据编制, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。)