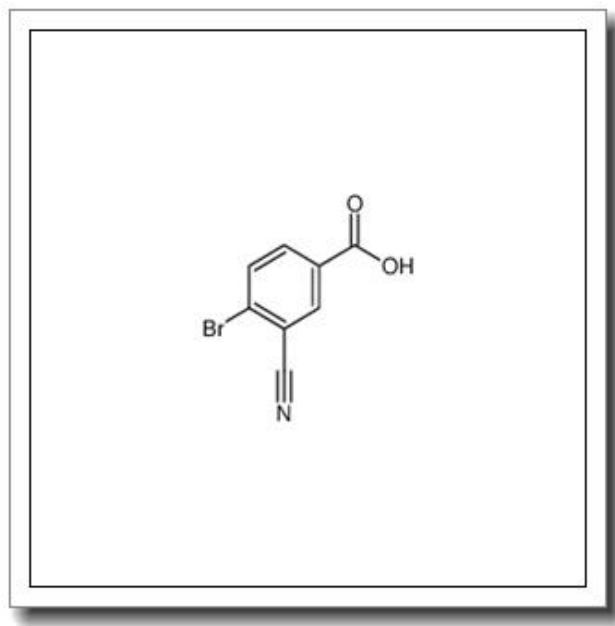


4-溴-3-氰基苯甲酸

4-Bromo-3-cyanobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-3-cyanobenzoic acid
中文名称	4-溴-3-氰基苯甲酸
CAS 号	887757-25-7
分子式	C ₈ H ₄ BrN ₂ O ₂
分子量	226.027
纯度	≥ 96%

产品说明

4-溴-3-氰基苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴-3-氰基苯甲酸 (4-Bromo-3-cyanobenzoic acid) 是一种芳香族羧酸衍生物，化学式为 $C_8H_4BrNO_2$ ，分子量 226.027，CAS 号为 887757-25-7。其结构包含溴原子和氰基的取代基，赋予其独特的电子效应和反应活性。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度通常 $\geq 96\%$ ，可溶于极性有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能有机合成砌块，4-溴-3-氰基苯甲酸兼具卤素和氰基的化学特性，可通过亲核取代、偶联反应或羧基衍生化参与复杂分子构建。氰基的强吸电子效应与溴原子的可离去性使其成为药物化学中设计酶抑制剂或受体调节剂的理想中间体，尤其在激酶靶向化合物开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和材料科学领域。在医药领域，常用于合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的活性分子片段；在材料科学中，可作为液晶材料或有机光电材料的合成前体。其溴原子支持钯催化的交叉偶联反应（如 Suzuki 反应），而羧基可进一步酯化或酰胺化，扩展结构多样性。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中，温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护，避免吸湿和氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中操作，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解时优先选用 DMSO 或 DMF，若需水相反应，建议使用 pH 缓冲体系以提高溶解度。

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。MSDS 数据显示其具有刺激性，可能引起眼睛和皮肤炎症，操作后需彻底清洗接触部位。废弃物处置应遵守

当地法规，不可直接排入下水道。运输分类为非危险品，但需避免与强氧化剂共存。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件验证。