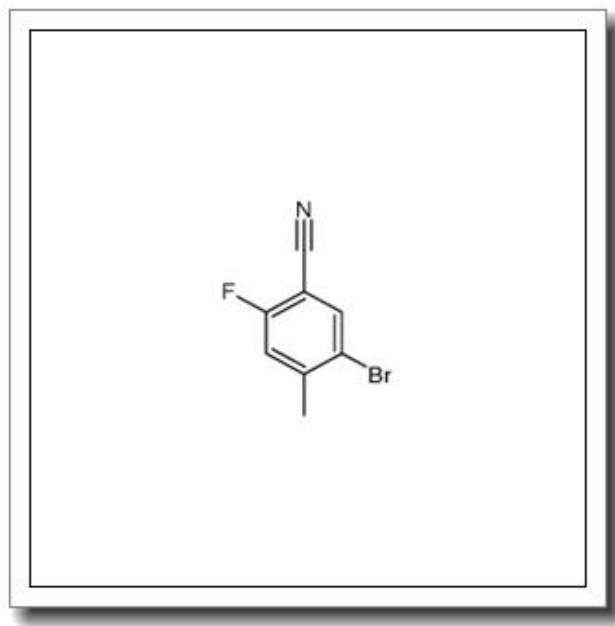


5-溴-2-氟-4-甲基苯甲腈

5-Bromo-2-fluoro-4-methylbenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-2-fluoro-4-methylbenzonitrile
中文名称	5-溴-2-氟-4-甲基苯甲腈
CAS 号	1269493-45-9
分子式	C ₈ H ₅ BrFN
分子量	214.034
纯度	≥96%

产品说明

5-溴-2-氟-4-甲基苯甲腈 (5-Bromo-2-fluoro-4-methylbenzotrile) 是一种重要的有机合成中间体, 广泛应用于医药、农药和材料科学领域。其化学式为 C_8H_5BrFN , 分子量为 214.034, CAS 号为 1269493-45-9。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常不低于 96%, 具有良好的化学稳定性和反应活性。

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-氟-4-甲基苯甲腈是一种含溴、氟取代基的芳香族腈类化合物。其分子结构中溴原子的引入增强了化合物的亲电性, 而氟原子的存在则提高了其生物活性和代谢稳定性。该化合物在常温下稳定, 微溶于水, 易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和乙腈。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能合成砌块, 该化合物在药物化学中常用于构建活性分子骨架, 尤其是靶向酶或受体的抑制剂开发。氟原子的引入可显著改善化合物的脂溶性和细胞膜穿透能力, 而溴原子则为后续的偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 提供了关键位点。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 该化合物是合成抗肿瘤、抗病毒药物的重要中间体。农药工业中用于开发高效低毒杀虫剂和杀菌剂。此外, 在材料科学中可作为液晶材料或有机发光二极管 (OLED) 的功能性前体。具体应用包括但不限于: EGFR 抑制剂合成、杂环化合物构建以及新型光电材料研发。

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, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO, 工作浓度需根据实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 重金属残留符合 USP 标准。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 吸入或食入可能有害。操作时应避

免直接接触，如发生暴露需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵守当地危险化学品管理规定，建议采用专业焚烧法处置。

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗用途。使用者应具备专业化学知识并严格遵守实验室安全规范。