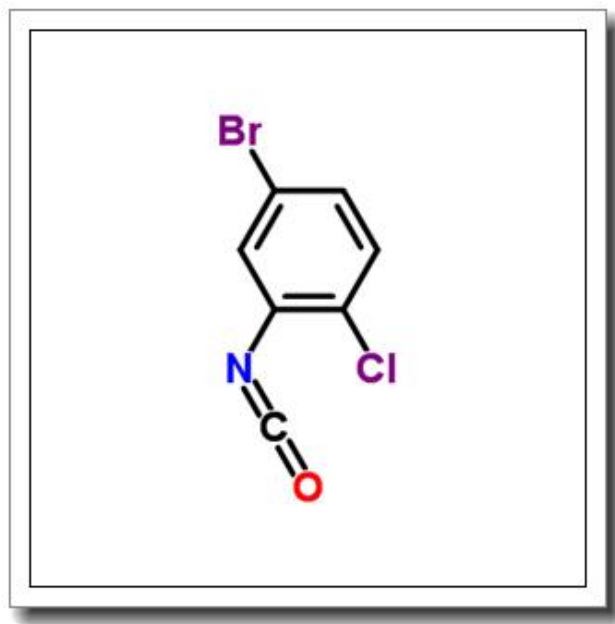


5-溴-2-氯苯基异腈酸酯

5-Bromo-2-Chlorophenylisocyanate



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-2-Chlorophenylisocyanate
中文名称	5-溴-2-氯苯基异腈酸酯
CAS 号	923693-67-8
分子式	C ₇ H ₃ BrClN ₁ O
分子量	232.462
纯度	≥ 96%

产品说明

5-溴-2-氯苯基异腈酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-氯苯基异腈酸酯 (5-Bromo-2-Chlorophenylisocyanate) 是一种有机异腈酸酯类化合物, 化学式为 $C_7H_3BrClNO$, 分子量为 232.462, CAS 号为 923693-67-8。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有典型的异腈酸酯刺激性气味。其结构中包含溴和氯取代基, 赋予其独特的反应活性和电子效应, 适合作为有机合成中间体或功能化试剂使用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为异腈酸酯衍生物, 可通过与氨基、羟基等亲核基团反应生成脲、氨基甲酸酯等结构, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。溴和氯原子的引入增强了其分子极性, 使其在偶联反应或过渡金属催化反应中表现出更高的选择性, 常用于构建复杂杂环或功能化芳烃骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品可用于合成抗肿瘤、抗炎等活性分子的关键中间体; 在农药化学中, 作为修饰基团参与高效杀虫剂或除草剂的开发; 在高分子材料领域, 可作为交联剂或改性剂提升聚合物性能。此外, 其也是荧光染料和光敏材料的潜在合成原料。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于干燥、阴凉 ($2-8^{\circ}C$)、避光环境中, 远离湿气和氧化剂。建议在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 使用时应佩戴防毒面具、化学防护手套及护目镜。因异腈酸酯易与水分反应释放二氧化碳, 开封后需尽快使用, 避免长时间暴露于空气中。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 杂质主要为同系物及水解产物。安全数据表明, 其具有强刺激性, 接触皮肤或眼睛可能引起灼伤, 吸入蒸气会导致呼吸道损伤。操作应

在通风橱中进行，若发生泄漏需用惰性吸附材料处理。废弃物需按危险化学品规范处置，严禁直接排放。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）