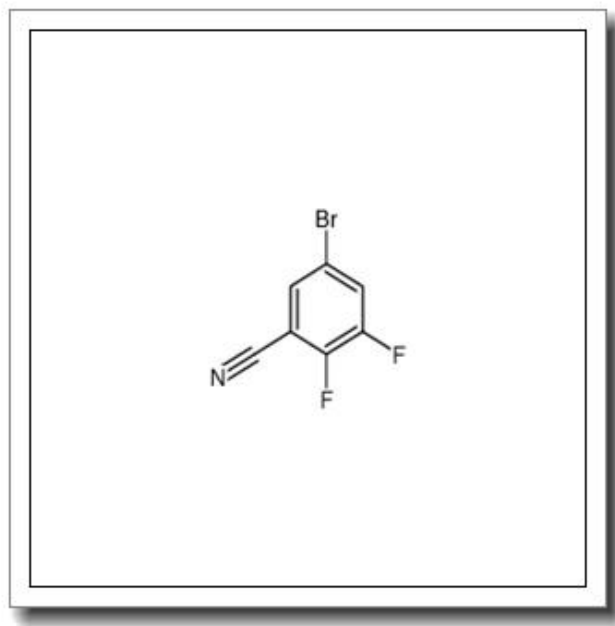


5-溴-2,3-二氟苯甲腈

5-Bromo-2,3-difluorobenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-2,3-difluorobenzonitrile
中文名称	5-溴-2,3-二氟苯甲腈
CAS 号	1105665-42-6
分子式	C ₇ H ₂ BrF ₂ N
分子量	217.998
纯度	≥ 96%

产品说明

5-溴-2,3-二氟苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2,3-二氟苯甲腈 (5-Bromo-2,3-difluorobenzonitrile) 是一种含卤素取代的芳香腈类化合物, 化学式为 $C_7H_2BrF_2N$, 分子量为 217.998, CAS 号为 1105665-42-6。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中的溴原子和氟原子赋予其较高的反应活性, 而氰基则增强了其在偶联反应中的适用性。该物质易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和丙酮, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳香族卤代物, 5-溴-2,3-二氟苯甲腈是医药和农药中间体合成中的关键砌块。其分子中的卤素位点可通过 Suzuki、Buchwald-Hartwig 等偶联反应进一步功能化, 而氰基可作为羧酸、酰胺等官能团的前体。在药物研发中, 此类结构常用于构建具有生物活性的杂环化合物或靶向分子, 尤其在抗肿瘤和抗感染药物设计中表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于以下领域:

- (1) 医药中间体: 用于合成含二氟苯基的活性药物成分 (API), 如激酶抑制剂或抗菌剂。
- (2) 材料科学: 作为液晶材料或有机半导体材料的合成前体。
- (3) 农药开发: 参与构建高效低毒的除草剂或杀虫剂分子骨架。
- (4) 科研用途: 在有机方法学研究中作为标准底物验证新反应体系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。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、护目镜及防尘口罩。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF, 若出现沉淀可通过温和加热 ($\leq 60^{\circ}C$) 助溶。

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 ppm。安全数据表明其具有刺激性，可能引起皮肤、眼睛和呼吸道不适。操作时应避免直接接触，如不慎沾染需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。详细毒理学数据请参阅配套的 MSDS 文件。

注：本说明仅限专业研究人员参考，非实验室人员禁止接触。产品具体应用需结合实验方案调整。