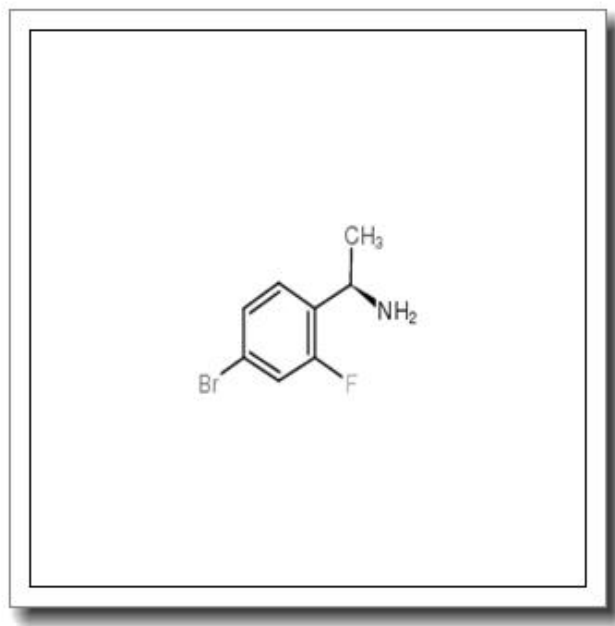


(AR)-4-溴-2-氟-A-甲基苯甲胺

(1R)-1-(4-bromo-2-fluorophenyl)ethanamine



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R)-1-(4-bromo-2-fluorophenyl)ethanamine
中文名称	(AR)-4-溴-2-氟-A-甲基苯甲胺
CAS 号	845930-79-2
分子式	C ₈ H ₉ BrFN
分子量	218.066
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(1R)-1-(4-溴-2-氟苯基)乙胺 (中文别名: (AR)-4-溴-2-氟-A-甲基苯甲胺) 是一种手性有机化合物, CAS 号为 845930-79-2, 分子式为 C₈H₉BrFN, 分子量为 218.066。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度 ≥96%, 具有明确的立体构型 (R 构型)。其结构中包含溴和氟取代基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在有机合成中表现出高反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性胺类中间体, 在生物活性分子构建中具有关键作用。其苯环上的溴和氟取代基可增强分子脂溶性, 促进跨膜传输能力, 同时氟原子的引入能显著改善代谢稳定性。R 构型的手性中心使其在不对称合成中可作为手性诱导剂或催化剂配体, 广泛应用于药物活性成分的立体选择性合成。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为抗抑郁剂、抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂) 的关键手性砌块
- 农药化学: 用于合成具有靶向活性的农用化学品中间体
- 材料科学: 参与液晶材料或高分子单体的改性合成

典型反应包括: Buchwald-Hartwig 偶联、Suzuki-Miyaura 交叉偶联等过渡金属催化反应。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 温度控制在 2-8°C 避光保存。开封后建议在干燥手套箱中操作, 避免吸湿分解。使用时需注意:

- 溶解性: 易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水
- 稳定性: 对光敏感, 长时间暴露可能引起消旋化
- 操作防护: 需在通风橱中佩戴化学护目镜及丁腈手套

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC（面积归一化法）确保纯度 $\geq 96\%$ ，手性 HPLC 检测对映体过量值

（e. e.） $\geq 98\%$ 。安全数据如下：

- GHS 分类：皮肤腐蚀/刺激（Category 2）、急性毒性（口服，Category 4）
- 应急处理：皮肤接触时立即用肥皂水冲洗 15 分钟，眼睛接触需用生理盐水持续冲洗
- 废弃物处置：按危险有机卤化物处理，不可直接排入下水道

注：本产品仅供科研用途，不适用于食品、药品或家用领域。建议使用者具备有机合成实验经验并查阅最新版 MSDS 后操作。