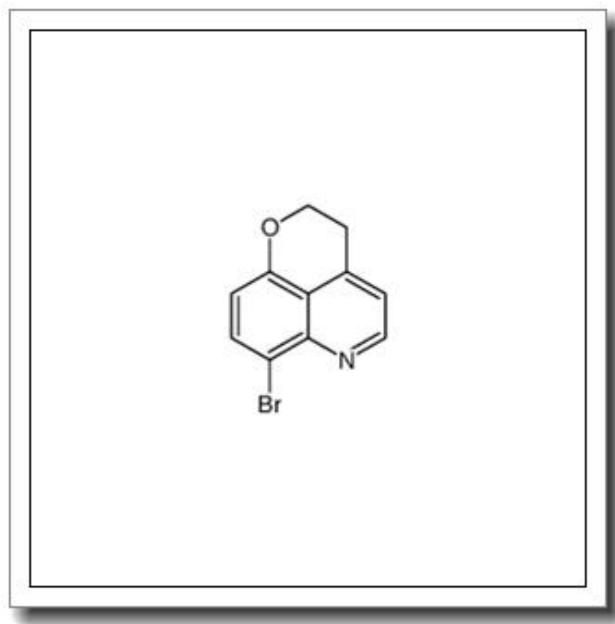


# 产品\_5598

*5-(2-Chloropyrimidin-4-Yl)-2,4-Difluorobenzonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(2-Chloropyrimidin-4-Yl)-2,4-Difluorobenzonitrile
中文名称	产品_5598
CAS 号	1155270-72-6
分子式	C11H8BrN0
分子量	250.091
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-(2-氯嘧啶-4-基)-2,4-二氟苯甲腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 5-(2-Chloropyrimidin-4-yl)-2,4-difluorobenzonitrile, 中文简称产品\_5598, CAS 号 1155270-72-6, 分子式 C<sub>11</sub>H<sub>8</sub>BrN<sub>0</sub>, 分子量 250.091。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度≥96%, 具有嘧啶环与苯甲腈的双重结构特征, 其氯代和氟取代基赋予其独特的反应活性。易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 微溶于水 (25℃时溶解度<0.1 mg/mL)。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类衍生物, 该化合物可通过嘧啶环的氮原子参与氢键形成, 与生物靶标 (如激酶或核酸) 产生特异性相互作用。2,4-二氟苯甲腈结构增强了其细胞膜穿透能力, 而氯取代基可作为后续偶联反应的活性位点, 使其在药物化学中成为关键中间体。其分子设计兼顾了稳定性和反应性, 适用于高通量筛选和结构优化研究。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

产品\_5598 主要用于医药研发领域, 尤其作为激酶抑制剂和抗肿瘤药物的核心骨架。具体用途包括: 1) 用于构建小分子抑制剂库, 靶向 EGFR、VEGFR 等酪氨酸激酶; 2) 作为荧光标记探针的前体, 用于细胞成像研究; 3) 在有机合成中作为多官能团砌块, 通过 Suzuki 偶联等反应进一步衍生化。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中, 短期使用可存放于 4℃。开封后需充氮密封保存, 避免反复冻融。实验操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用预冷的 DMSO (浓度≤10 mM), 现配现用以避免水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%, 批次间差异<1%。MS 和 NMR 谱图数据可随 COA 提供。安全提示: 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 吸入或误食有害。应急处理:

接触皮肤后立即用大量清水冲洗 15 分钟，就医时携带物质安全数据表（MSDS）。  
废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

（注：实际使用前请查阅最新版 MSDS 并执行风险评估。）