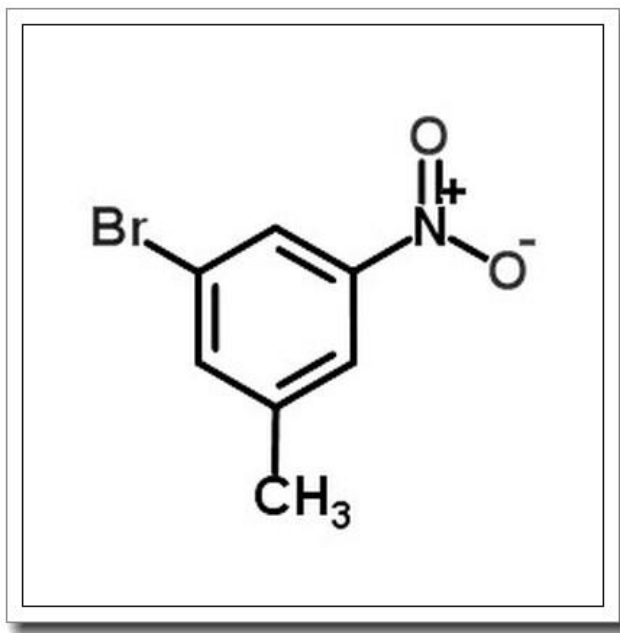


3-溴-5-硝基甲苯

3-Bromo-5-Nitrotoluene



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Bromo-5-Nitrotoluene
中文名称	3-溴-5-硝基甲苯
CAS 号	52488-28-5
分子式	C ₇ H ₆ BrNO ₂
分子量	216.032
纯度	>96%

产品说明

3-溴-5-硝基甲苯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-5-硝基甲苯 (3-Bromo-5-Nitrotoluene) 是一种有机芳香族化合物，化学式为 $C_7H_6BrNO_2$ ，分子量为 216.032。该化合物为淡黄色至棕色结晶或粉末，CAS 号为 52488-28-5，纯度通常高于 96%。其结构由甲苯母核在 3 位引入溴原子、5 位引入硝基官能团构成，兼具芳香烃的稳定性和卤代硝基化合物的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为硝基和溴双取代的甲苯衍生物，该化合物在有机合成中具有重要价值。硝基的强吸电子效应与溴原子的亲电性使其成为构建复杂分子的关键中间体，尤其在药物化学和材料科学领域。其结构特性可用于进一步衍生化，例如通过还原硝基制备氨基化合物，或通过卤素置换反应引入其他官能团。

3. 主要应用领域与具体用途

3-溴-5-硝基甲苯广泛应用于医药、农药和染料中间体的合成。在医药研发中，它是构建抗肿瘤和抗菌化合物的重要前体；在农药领域，可用于合成高效杀虫剂和除草剂；此外，其硝基和溴基团还可作为荧光染料和液晶材料的修饰位点。实验室中常用于 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于阴凉干燥处，推荐温度为 2-8°C，长期储存建议充氮保护。使用时应穿戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水，反应体系需严格除氧以防副反应。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表 (SDS) 显示其为刺激性化学品，UN 编号需根据运输形式确定。泄漏处理需用惰性吸附材料

收集，废液按危险有机物处置。急性毒性 LD50（大鼠经口）数据见 SDS 第 11 节，操作应在通风橱中进行，远离火源和氧化剂。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件验证。更多技术参数请参阅随货分析证书或联系技术支持。