

# 4-bromo-7-(dibromomethyl)-2,1,3-benzothiadiazole

*4-bromo-7-(dibromomethyl)-2,1,3-benzothiadiazole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-bromo-7-(dibromomethyl)-2,1,3-benzothiadiazole
中文名称	4-bromo-7-(dibromomethyl)-2,1,3-benzothiadiazole
CAS 号	1239277-96-3
分子式	C7H3Br3N2S
分子量	386.889
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-bromo-7-(dibromomethyl)-2,1,3-benzothiadiazole 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为苯并噻二唑类衍生物，化学名称为 4-溴-7-(二溴甲基)-2,1,3-苯并噻二唑，CAS 号为 1239277-96-3，分子式  $C_7H_3Br_3N_2S$ ，分子量 386.889。其结构特征为苯并噻二唑核心骨架上的 4 位溴取代与 7 位二溴甲基取代，赋予该化合物独特的电子效应和空间位阻。常温下呈白色至淡黄色结晶粉末，纯度 >96%，可通过 HPLC 和 NMR 验证。该化合物在有机溶剂如二氯甲烷、THF 中溶解性良好，但在水中几乎不溶。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为卤代苯并噻二唑类化合物，其分子中的溴原子及噻二唑环结构使其成为重要的有机合成中间体。噻二唑环具有显著的电子亲和性，可用于构建光电材料或作为配体参与金属催化反应。二溴甲基的活性位点可进一步衍生化，在药物化学中用于构建抗肿瘤或抗菌活性分子的核心骨架。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域：

- (1) 有机合成：作为关键中间体用于构建复杂杂环化合物，特别是含硫氮杂环体系。
- (2) 材料科学：用于开发有机半导体、荧光探针或光电转换材料，其刚性平面结构有助于分子堆叠。
- (3) 药物研发：作为先导化合物修饰位点，常见于抗病毒或抗炎药物的结构优化。
- (4) 农用化学品：苯并噻二唑衍生物在植物抗病诱导剂中有潜在应用价值。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥惰性气体（如氩气）环境下长期储存。开封后需充氮保

护，避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水级有机溶剂，若需长期保存溶液建议添加稳定剂（如 BHT）。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，重金属含量<10ppm。安全数据表明其对皮肤和眼睛有刺激性，操作时需符合 GHS 分类标准（H315/H319）。废弃物处理应遵循有机卤化物处置规范，避免与强氧化剂接触。提供 MSDS 及 COA 随货文件，详细毒理学数据可另行索取。

注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请进行小试验证。