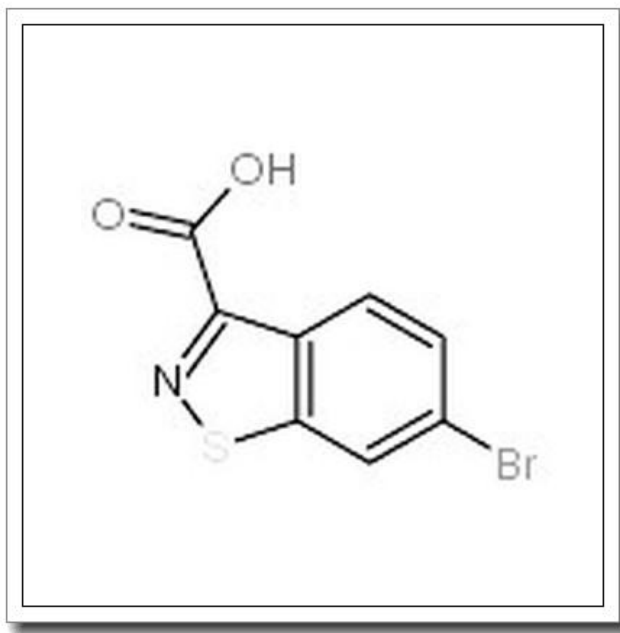


6-溴-1,2-苯并异噻唑-3-甲酸

6-Bromobenzo[d]isothiazole-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Bromobenzo[d]isothiazole-3-carboxylic acid
中文名称	6-溴-1,2-苯并异噻唑-3-甲酸
CAS 号	677304-75-5
分子式	C ₈ H ₄ BrN ₀ S ₂
分子量	258.092
纯度	>96%

产品说明

6-溴-1,2-苯并异噻唑-3-甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-溴-1,2-苯并异噻唑-3-甲酸 (6-Bromobenzo[d]isothiazole-3-carboxylic acid) 是一种含溴杂环羧酸化合物，化学式为 $C_8H_4BrN_0S_2$ ，分子量为 258.092，CAS 号为 677304-75-5。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有苯并异噻唑骨架结构，其 3 位羧基和 6 位溴原子赋予其独特的化学反应活性。该物质易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），微溶于水，需在酸性或碱性条件下调节溶解度。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并异噻唑类衍生物，该化合物可通过羧基与氨基的缩合反应形成酰胺键，或通过溴原子参与偶联反应（如 Suzuki 偶联），是构建复杂杂环分子的关键中间体。其结构中的异噻唑环具有潜在的生物活性，在药物化学中常用于抗菌、抗炎及激酶抑制剂类药物的研发。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和材料科学领域。在医药研发中，可作为合成抗肿瘤或抗感染药物的前体；在材料科学中，可用于制备有机光电功能材料的共轭单元。具体实验用途包括：

1. 作为有机合成中间体，用于构建含苯并异噻唑骨架的靶分子
2. 在金属催化反应中作为配体或底物
3. 用于结构-活性关系（SAR）研究的活性分子修饰

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用 DMSO 或碱性水溶液（ $pH > 8$ ），浓度根据实验需求调整。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间质量稳定。安全数据如下：

1. 安全警示：可能引起皮肤和眼睛刺激，避免吸入粉尘
2. 应急处理：接触皮肤后立即用大量清水冲洗
3. 废弃物处置：按危险化学品规范处理
4. 运输分类：非危险品，但建议低温运输

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验体系验证。