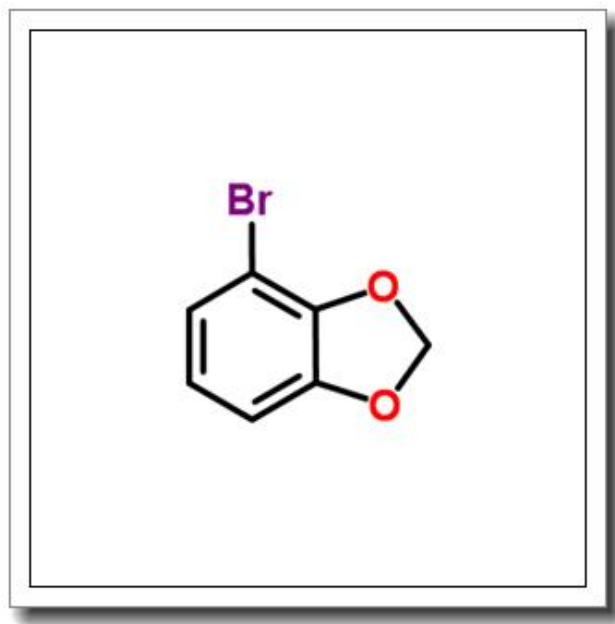


4-溴-1,3-苯并二恶唑

4-Bromo-1,3-benzodioxole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-1,3-benzodioxole
中文名称	4-溴-1,3-苯并二恶唑
CAS 号	6698-13-1
分子式	C ₇ H ₅ BrO ₂
分子量	201.017
纯度	≥ 96%

产品说明

4-溴-1,3-苯并二恶唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴-1,3-苯并二恶唑 (4-Bromo-1,3-benzodioxole) 是一种有机溴化物, 化学式为 $C_7H_5BrO_2$, 分子量 201.017, CAS 号 6698-13-1。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有苯并二恶唑环结构, 溴原子取代于苯环 4 位, 赋予其独特的反应活性。其熔点为 $45-48^\circ C$, 沸点约 $230^\circ C$, 易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和氯仿, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并二恶唑类衍生物, 该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体。其结构中的溴原子可通过亲核取代反应引入其他官能团, 而苯并二恶唑环则常见于药物和农药分子中, 具有调节生物活性的潜力。在药物化学中, 此类结构常与抗菌、抗炎或中枢神经系统活性相关。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于有机合成和医药研发领域。具体用途包括:

- 药物中间体: 用于合成抗抑郁剂、抗真菌剂等含苯并二恶唑结构的药物。
- 农药开发: 作为杀菌剂或杀虫剂的合成前体。
- 材料科学: 参与制备荧光染料或高分子材料的功能性单体。
- 科研试剂: 用于研究芳香族亲电取代反应的模型化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、干燥, 温度控制在 $2-8^\circ C$ (长期储存) 或室温 (短期使用)。避免与强氧化剂、强酸强碱接触。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 在通风橱中进行称量与反应。若需溶解, 建议使用惰性有机溶剂并缓慢加热至 $60^\circ C$ 以下。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据如下:

- GHS 分类: 皮肤刺激 (类别 2)、眼睛刺激 (类别 2A)
- 危险代码: H315 (造成皮肤刺激)、H319 (造成严重眼刺激)
- 应急处理: 皮肤接触时用肥皂水冲洗, 眼睛接触后立即用生理盐水冲洗 15 分钟, 必要时就医。废弃物应作为有害化学品处置, 符合当地环保法规。

注: 本说明仅提供基础信息, 具体实验方案需结合文献与安全评估执行。