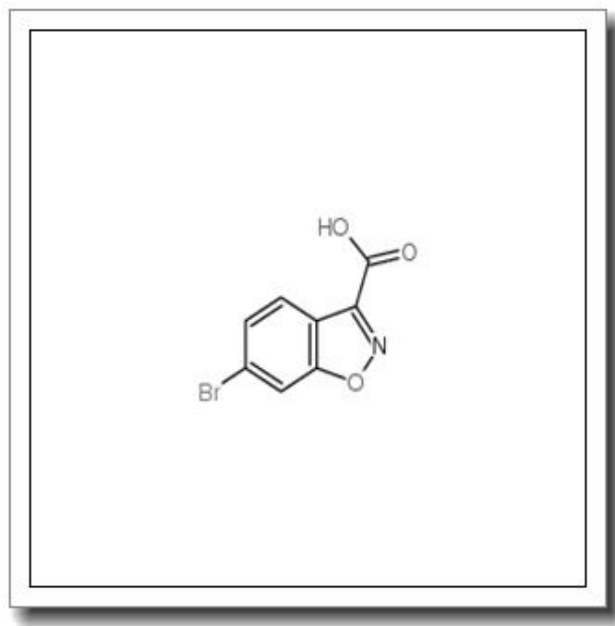


6-溴-苯并[d]异噁唑-3-羧酸

6-bromo-1,2-benzoxazole-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-bromo-1,2-benzoxazole-3-carboxylic acid
中文名称	6-溴-苯并[d]异噁唑-3-羧酸
CAS 号	1123169-17-4
分子式	C ₈ H ₄ BrN ₁ O ₃
分子量	242.026
纯度	≥96%

产品说明

6-溴-苯并[d]异噁唑-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-溴-苯并[d]异噁唑-3-羧酸 (6-bromo-1,2-benzoxazole-3-carboxylic acid) 是一种含溴杂环羧酸化合物，化学式为 $C_8H_4BrNO_3$ ，分子量 242.026，CAS 号为 1123169-17-4。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有苯并异噁唑骨架结构，其羧基和溴原子赋予其独特的反应活性，可参与偶联、酯化及亲核取代等反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是医药和农药中间体的关键构建模块，其苯并异噁唑结构广泛存在于具有抗菌、抗炎及抗肿瘤活性的分子中。溴原子的引入可增强化合物的脂溶性和靶标结合能力，而羧基则为后续衍生化提供重要位点，在药物结构修饰中具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物研发领域，本品常用于合成激酶抑制剂、抗菌剂及抗病毒药物的前体。农业化学中，可作为杀菌剂或杀虫剂的中间体。此外，在材料科学中可用于制备荧光探针或功能性高分子材料。具体应用需根据实验设计进一步衍生化。

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。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)，微溶于甲醇，难溶于水，建议根据实验需求选择合适的溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，MS 和 NMR 验证结构。安全数据表明其对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。具体实验方案请参考相关文献或咨询专业技术支持。