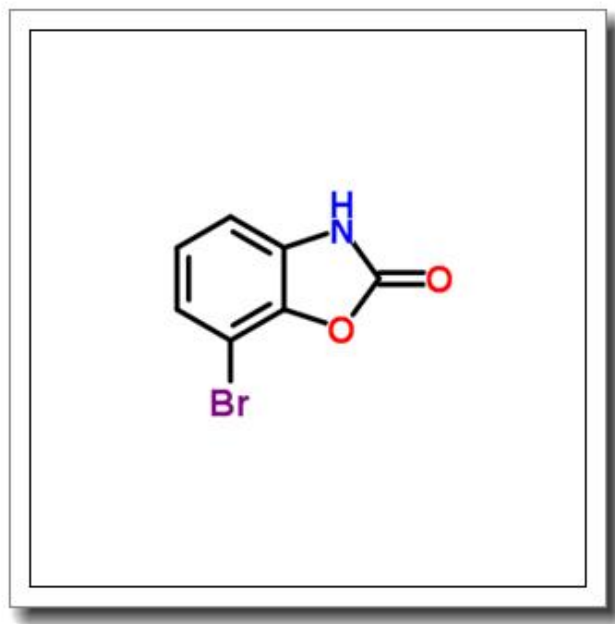


7-溴-3H-苯并噁唑-2-酮

7-Bromobenzo[d]oxazol-2(3H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	7-Bromobenzo[d]oxazol-2(3H)-one
中文名称	7-溴-3H-苯并噁唑-2-酮
CAS 号	871367-14-5
分子式	C ₇ H ₄ BrN ₁ O ₂
分子量	214.016
纯度	≥ 96%

产品说明

7-溴-3H-苯并噁唑-2-酮 (7-Bromobenzo[d]oxazol-2(3H)-one) 是一种重要的有机合成中间体, CAS 号为 871367-14-5, 分子式为 $C_7H_4BrNO_2$, 分子量为 214.016。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有苯并噁唑酮骨架结构, 其溴取代基赋予其独特的反应活性, 使其在亲核取代和金属催化偶联反应中表现出色。该物质易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和 N,N-二甲基甲酰胺 (DMF), 微溶于甲醇和乙醇, 几乎不溶于水, 需在干燥避光条件下保存。

在生物化学领域, 该化合物作为杂环芳香族衍生物, 其结构特征使其成为构建复杂生物活性分子的关键模块。苯并噁唑酮类化合物普遍表现出抗菌、抗炎和抗肿瘤活性, 而 7-位溴原子的引入可显著增强其与生物靶标的相互作用能力, 常用于药物先导化合物的结构优化。该分子还可作为荧光探针的母核结构, 应用于生物标记和分子成像研究。

该产品主要应用于医药研发和材料科学领域。在药物化学中, 它是合成酪氨酸激酶抑制剂和 GABAA 受体调节剂的重要中间体。在材料领域, 可用于制备有机电致发光材料 (OLED) 和光电转换材料。实验室中常用于 Suzuki-Miyaura 偶联反应、Buchwald-Hartwig 胺化反应等交叉偶联反应, 以及作为构建稠杂环体系的起始原料。

建议将本品储存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免与强氧化剂接触。开封后需充入惰性气体保护, 并密封保存。使用时应在通风橱中操作, 避免直接吸入粉尘或接触皮肤。溶解时建议先以少量 DMSO 预溶, 再稀释至所需浓度。长期储存前建议进行纯度验证。

本产品通过 HPLC 进行质量控制, 确保主峰面积 $\geq 96\%$, 同时检测重金属残留 ($\leq 20\text{ppm}$) 和水分含量 ($\leq 0.5\%$)。安全信息显示该物质可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴防护眼镜和丁腈手套。如发生接触, 需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品处理法规, 不可直接排入下水道。