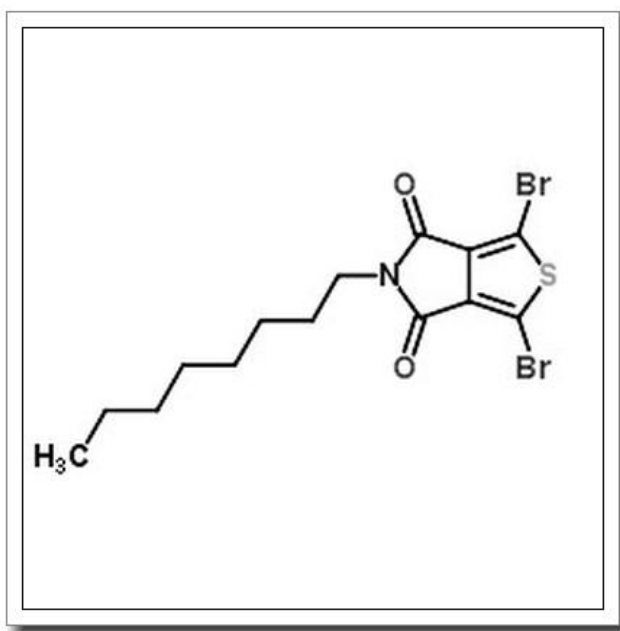


2,5-二溴-N-正辛基-3,4-噻吩二甲酰亚胺

1,3-Dibromo-5-octyl-4H-thieno[3,4-c]pyrrole-4,6(5H)-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,3-Dibromo-5-octyl-4H-thieno[3,4-c]pyrrole-4,6(5H)-dione
中文名称	2,5-二溴-N-正辛基-3,4-噻吩二甲酰亚胺
CAS 号	566939-58-0
分子式	C ₁₄ H ₁₇ Br ₂ N ₂ O ₂ S
分子量	423.163
纯度	>96%

产品说明

1, 3-二溴-5-辛基-4H-噻吩并[3, 4-c]吡咯-4, 6(5H)-二酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1, 3-Dibromo-5-octyl-4H-thieno[3, 4-c]pyrrole-4, 6(5H)-dione, 中文名为 2, 5-二溴-N-正辛基-3, 4-噻吩二甲酰亚胺, CAS 号为 566939-58-0。其分子式为 C₁₄H₁₇Br₂N₀S, 分子量为 423. 163, 纯度经高效液相色谱分析确认大于 96%。该化合物为淡黄色至棕色结晶粉末, 具有典型的芳香杂环结构, 噻吩并吡咯二酮骨架赋予其独特的电子受体特性, 辛基侧链增强了溶解性和分子自组装能力。

2. 生物化学功能与重要性

作为高性能有机半导体材料的核心合成砌块, 该化合物因其强拉电子能力和可调控的能级结构, 在光电转换领域具有重要价值。溴取代位点可进一步通过偶联反应构建共轭聚合物, 而辛基链能有效改善材料在有机溶剂中的加工性能。其在激子分离和电荷传输方面的优异表现, 使其成为有机太阳能电池、场效应晶体管等器件开发的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于有机电子材料研发领域: 1) 作为给体-受体型共轭聚合物的单体, 用于制备窄带隙光电材料; 2) 在钙钛矿太阳能电池中作为界面修饰层的前驱体; 3) 经进一步功能化后可用于制备近红外荧光探针。具体使用时需在惰性气体保护下进行偶联反应, 推荐与三甲基锡或硼酸酯类化合物进行 Stille/Suzuki 交叉偶联。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光保存于-20℃的干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体。开封后应在手套箱中取用, 避免接触湿气。溶解性测试表明其在氯仿、二氯甲烷中溶解度大于 50 mg/mL, N, N-二甲基甲酰胺中约为 30 mg/mL。实验操作建议使用 Schlenk 技术, 反应溶剂需预先脱氧处理。

5. 质量控制与安全信息

批次质量控制采用 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 和质谱联用技术确保纯度。安全数据表明该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴护目镜和防毒面具。急性毒性 LD₅₀ (大鼠经口) >2000 mg/kg, 属于低毒类化学品, 但溴代物在高温下可能释放有害气体。废弃物处理应遵照危险有机溴化物处置规范, 使用专用容器收集并由专业机构处理。