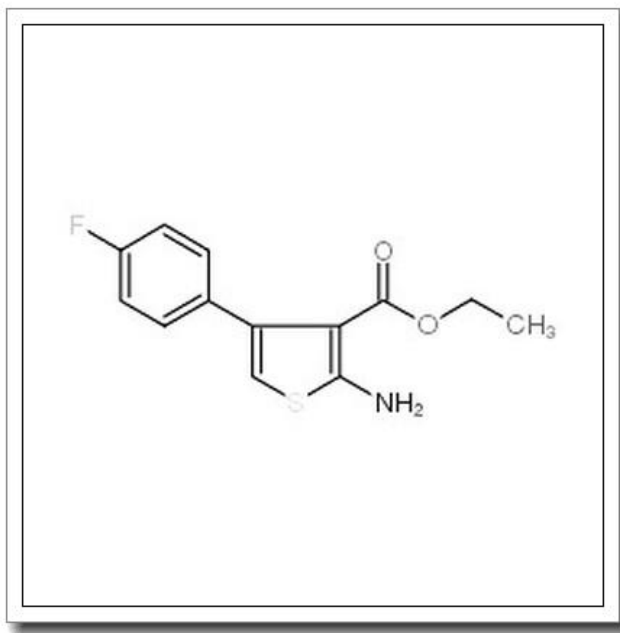


2-氨基-4-(4-氟苯基)噻吩-3-甲酸乙酯

Ethyl 2-amino-4-(4-fluorophenyl) thiophene-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 2-amino-4-(4-fluorophenyl) thiophene-3-carboxylate
中文名称	2-氨基-4-(4-氟苯基)噻吩-3-甲酸乙酯
CAS 号	35978-33-7
分子式	C13H12FN02S
分子量	265.303
纯度	>96%

产品说明

2-氨基-4-(4-氟苯基)噻吩-3-甲酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Ethyl 2-amino-4-(4-fluorophenyl) thiophene-3-carboxylate, CAS 号为 35978-33-7, 是一种含氟噻吩衍生物。其分子式为 C₁₃H₁₂FN₂O₂S, 分子量 265.303, 常温下为白色至淡黄色结晶粉末, 纯度 ≥96%。该化合物具有噻吩环与氨基、酯基的协同电子效应, 4-氟苯基的引入增强了其疏水性和生物活性, 使其在有机合成中表现出独特反应性。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻吩类化合物的关键中间体, 其结构中的氨基和酯基可作为活性位点参与缩合、环化等反应。氟原子的存在显著提升分子穿透细胞膜的能力, 在药物化学中常用于先导化合物修饰, 以优化代谢稳定性和靶标结合力。该分子在激酶抑制剂和抗炎药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发领域, 具体包括: 作为抗肿瘤药物 (如蛋白激酶抑制剂) 的合成砌块; 用于构建具有抗微生物活性的杂环化合物; 在材料科学中可作为有机半导体材料的前体。实验室级产品适用于高通量筛选和结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中, 避免光照及湿度波动。开封后需充惰性气体保护。溶解性测试显示易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较差 (<0.1 mg/mL)。实验操作应在通风橱中进行, 建议佩戴丁腈手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间 RSD <2%。MS 和 ¹H NMR 确保结构确证。该产品对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类: Category 2), 吸入或误食可能造成呼吸道损

伤。应急处理需参照 MSDS（编号：ECS-35978337-CH）执行，泄漏时用惰性吸附材料处理。运输归类为 UN2811（6.1 类危险品）。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品应用。使用前请查阅最新文献确认实验方案。