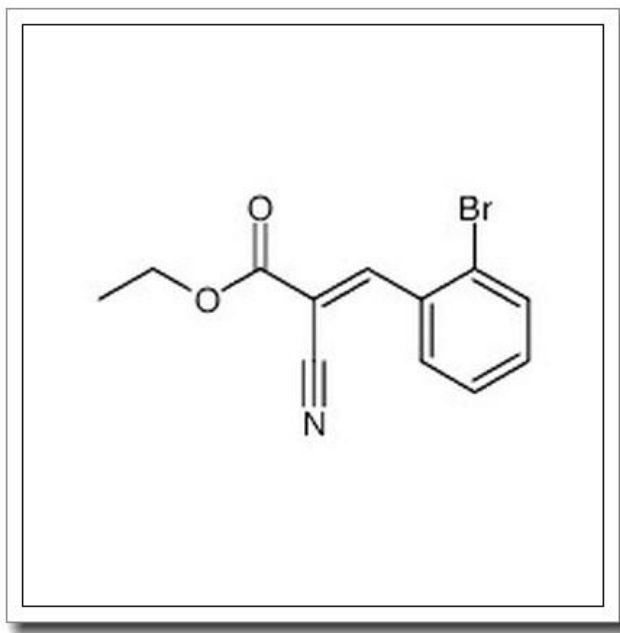


2-氰基-3-(2-溴苯基)丙烯酸乙酯

α-Cyan-o-bromzimtsaeureaethylester



产品基本信息

属性	值
化学名称	α -Cyan-o-bromzimtsaeureaethylester
中文名称	2-氰基-3-(2-溴苯基)丙烯酸乙酯
CAS 号	59803-32-6
分子式	C ₁₂ H ₁₀ BrN ₂ O ₂
分子量	280.117
纯度	>96%

产品说明

2-氰基-3-(2-溴苯基)丙烯酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 α -Cyan-o-bromzimsaeureaethylester, CAS 号为 59803-32-6, 分子式为 $C_{12}H_{10}BrNO_2$, 分子量 280.117, 是一种高纯度 (>96%) 的溴苯基丙烯酸酯衍生物。其结构中的氰基和溴苯基赋予该化合物独特的电子效应与空间位阻, 使其在极性有机溶剂 (如 DMF、乙腈) 中具有良好的溶解性, 而在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为 α, β -不饱和羰基化合物, 该分子可通过迈克尔加成反应与生物大分子中的亲核基团 (如巯基、氨基) 结合, 在抑制剂设计和蛋白质标记领域具有重要价值。溴原子的引入进一步增强了其作为亲电试剂的活性, 使其成为合成含溴杂环化合物的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于以下领域:

- 3.1 药物化学: 用于构建抗肿瘤和抗炎药物的核心骨架, 如作为激酶抑制剂的合成前体。
- 3.2 材料科学: 参与制备光电功能材料, 特别是含溴共轭聚合物。
- 3.3 生物标记: 通过溴原子的特异性取代反应, 可用于荧光探针的修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氩气) 保护下密封保存, 储存温度 $-20^{\circ}C$, 避光防潮。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强氧化剂或还原剂接触。溶解推荐使用无水级有机溶剂, 并建议现配现用以保证反应活性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, MS 和 NMR 验证结构。安全数据如下:

- 5.1 危害性: 可能引起皮肤刺激和严重眼睛损伤, 操作时需佩戴护目镜和防化手

套。

5.2 应急处理：接触皮肤后立即用大量清水冲洗，若吸入需转移至空气新鲜处。

5.3 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排入下水道。

注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验。