

4-溴-2-硝基噻吩

4-Bromo-2-nitrothiophene



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-2-nitrothiophene
中文名称	4-溴-2-硝基噻吩
CAS 号	85598-49-8
分子式	C ₄ H ₂ BrNO ₂ S
分子量	208.033
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-溴-2-硝基噻吩 (4-Bromo-2-nitrothiophene, CAS 号: 85598-49-8) 是一种含溴和硝基取代的噻吩衍生物, 分子式为 $C_4H_2BrNO_2S$, 分子量为 208.033。该化合物为黄色至棕色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中溴原子和硝基的引入显著增强了反应活性, 使其成为有机合成中的重要中间体。噻吩环的芳香性及取代基的电子效应使其在特定反应中表现出独特的化学行为。

2. 生物化学功能与重要性

4-溴-2-硝基噻吩在生物化学领域主要用于构建杂环化合物和药物分子骨架。其硝基和溴原子可作为活性位点参与亲核取代、偶联反应等, 为合成含硫杂环化合物 (如噻吩并吡啶类) 提供关键前体。此外, 该化合物在材料科学中用于制备功能性高分子或光电材料, 因其结构可调控电子传输性能。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂广泛应用于医药研发、农药合成及材料科学领域。在医药中, 它是抗肿瘤、抗菌药物分子的重要合成中间体; 在农药领域, 用于构建含噻吩环的杀虫剂或杀菌剂; 在材料领域, 可作为有机半导体或荧光材料的修饰单元。具体用途包括 Suzuki 偶联反应、Buchwald-Hartwig 胺化反应等交叉偶联反应中的底物。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光、低温 ($2-8^{\circ}C$) 环境中, 避免与氧化剂、强酸强碱接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。因化合物对湿气敏感, 开封后应尽快使用并充入惰性气体保护。溶解性测试表明, 其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 数据以验证结构。安全信息显示, 该化合物可能对皮肤、眼睛和呼吸系统造成刺激, 操作时应避免吸入或直接接触。废弃物需按危险化学品规范处置。安全术语标识包括

H315（皮肤刺激）、H319（眼刺激）和 H335（呼吸道刺激），建议应急处理时使用大量清水冲洗并就医。