

4-溴噻吩-3-羧酸

4-Bromo-3-thiophenecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-3-thiophenecarboxylic acid
中文名称	4-溴噻吩-3-羧酸
CAS 号	16694-17-0
分子式	C ₅ H ₃ BrO ₂ S
分子量	207.045
纯度	>96%

产品说明

4-溴噻吩-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴噻吩-3-羧酸 (4-Bromo-3-thiophenecarboxylic acid) 是一种含溴取代基的噻吩羧酸衍生物，化学式为 $C_5H_3BrO_2S$ ，分子量 207.045，CAS 号为 16694-17-0。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，具有噻吩环的芳香性和羧酸的反应活性，同时溴原子的引入增强了其作为有机合成中间体的可修饰性。其熔点和溶解性（如微溶于水，易溶于有机溶剂）符合噻吩羧酸类化合物的典型特征。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是杂环化学和药物化学中的关键砌块，其结构中的溴原子可作为亲电取代或偶联反应的位点（如 Suzuki 偶联），羧酸基团则便于衍生化为酯、酰胺等官能团。在生物活性分子设计中，噻吩骨架广泛存在于抗菌、抗炎及抗肿瘤化合物中，而溴取代可调节分子的脂溶性和靶标结合能力，因此在先导化合物优化中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

4-溴噻吩-3-羧酸主要用于以下领域：

- (1) 医药中间体：合成噻吩类非甾体抗炎药或激酶抑制剂；
- (2) 材料科学：作为有机半导体或导电聚合物的前体；
- (3) 农药开发：构建含噻吩环的杀虫剂或杀菌剂；
- (4) 科研用途：用于有机方法学研究（如卤代芳烃的偶联反应）。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性环境中，温度控制在 2-8℃ 以延长稳定性。开封后需充氮保护，避免吸湿和氧化。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用 DMF 或 THF 等极性有机溶剂，反应条件应根据目标产物特性优化。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度>96%，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其具有刺激性，可能引起皮肤、眼睛和呼吸道不适。操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，若接触需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵守当地法规，不可直接排入环境。

（注：实际使用前请查阅最新版 MSDS 并执行风险评估。）