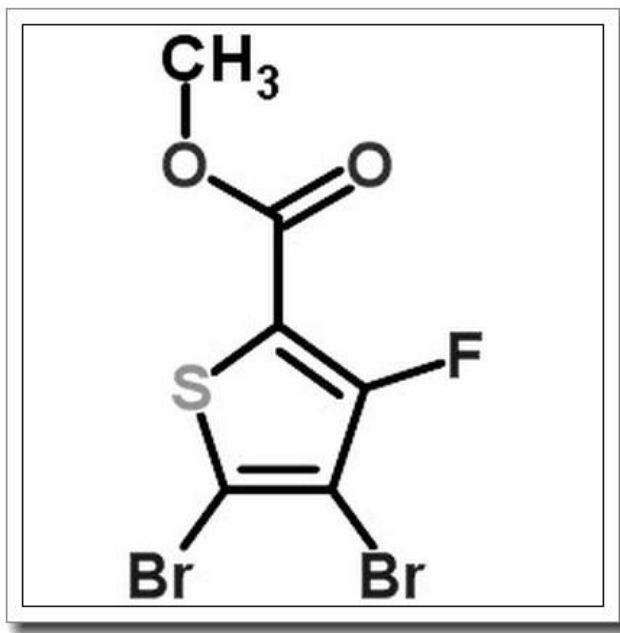


4,5-二溴-3-氟-2-噻吩甲酸甲酯

methyl 4,5-dibromo-3-fluorothiophene-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4,5-dibromo-3-fluorothiophene-2-carboxylate
中文名称	4,5-二溴-3-氟-2-噻吩甲酸甲酯
CAS 号	395664-58-1
分子式	C6H3Br2F02S
分子量	317.958
纯度	>96%

产品说明

4, 5-二溴-3-氟-2-噻吩甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4, 5-二溴-3-氟-2-噻吩甲酸甲酯 (methyl 4, 5-dibromo-3-fluorothiophene-2-carboxylate) 是一种含溴和氟取代的噻吩衍生物, CAS 号为 395664-58-1, 分子式为 $C_6H_3Br_2FO_2S$, 分子量为 317. 958。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 具有典型的酯类气味, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯, 微溶于水。其结构中的溴和氟原子赋予其较高的反应活性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻吩类化合物的衍生物, 该产品在药物化学和材料科学中具有重要价值。溴原子的引入增强了其作为亲电试剂的特性, 而氟原子的存在可调节分子的电子效应和脂溶性, 使其在生物活性分子设计中具有独特优势。其在抑制酶活性或作为中间体合成抗癌、抗病毒药物方面展现出潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于有机合成领域, 尤其是作为关键中间体参与以下反应:

- 用于构建含噻吩环的复杂分子, 如药物活性成分或功能材料前体。
- 在 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应中作为溴代底物。
- 作为荧光探针或半导体材料的修饰基团, 应用于光电材料研发。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免与强氧化剂、酸或碱接触。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套、护目镜及实验服。溶解建议使用无水 DMF 或 THF, 反应温度需根据具体实验条件优化。

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 COA (质量分析证书)。其 GHS 危害标识包括 H315 (皮肤刺激)、H319 (眼刺激) 和 H335 (呼吸道刺激)。若不慎接触皮

肤或眼睛，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。