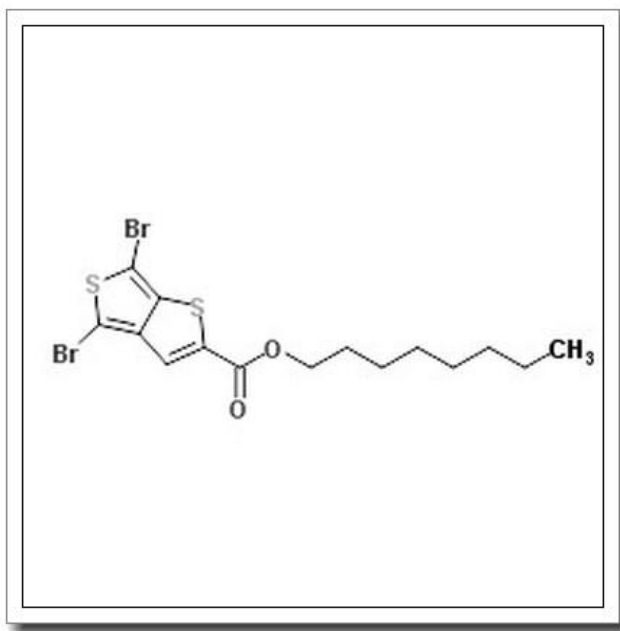


4,6-二溴噻吩[3,4-b]并噻吩-2-甲酸辛酯

octyl 4,6-dibromothieno[3,4-b]thiophene-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	octyl 4,6-dibromothieno[3,4-b]thiophene-2-carboxylate
中文名称	4,6-二溴噻吩[3,4-b]并噻吩-2-甲酸辛酯
CAS 号	1160823-85-7
分子式	C ₁₅ H ₁₈ Br ₂ O ₂ S ₂
分子量	454.24
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 octyl 4,6-dibromothiopheno[3,4-b]thiophene-2-carboxylate (4,6-二溴噻吩[3,4-b]并噻吩-2-甲酸辛酯), CAS 号 1160823-85-7, 分子式 $C_{15}H_{18}Br_2O_2S_2$, 分子量 454.24。该化合物属于噻吩并噻吩衍生物, 具有高度共轭的杂环结构, 其辛酯基团赋予其良好的脂溶性。纯度经 HPLC 验证大于 96%, 外观通常为白色至淡黄色结晶或粉末。其结构中 4,6 位的溴原子提供了高反应活性, 适用于进一步功能化修饰。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻吩类化合物的溴化衍生物, 该产品在有机电子材料领域具有重要价值。其共轭骨架可有效调节电子传输性能, 而溴原子的引入使其成为 Suzuki 偶联、Stille 偶联等交叉偶联反应的关键中间体。在光电材料研发中, 此类结构单元常用于构建聚合物半导体或小分子受体材料, 对提升有机太阳能电池 (OPV) 和场效应晶体管 (OFET) 的性能具有显著作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- (1) 有机光电材料合成: 作为构筑单元用于制备高性能共轭聚合物或小分子受体材料。
- (2) 医药中间体: 其特殊杂环结构可用于开发抗肿瘤或抗病毒药物的先导化合物。
- (3) 科研试剂: 在新型功能材料的基础研究中作为关键原料使用。

典型应用案例包括: 通过钯催化偶联反应制备低带隙共聚物, 或作为电子受体材料的核心片段进行分子设计。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封保存, 长期储存温度应低于 $-20^{\circ}C$ 。开封后需避免接触湿气, 建议在干燥氮气环境下分装使用。溶解性测试表明, 本品易溶于氯仿、二氯

甲烷等有机溶剂，使用时需在通风橱中操作。推荐反应条件为无水无氧环境，可通过 Schlenk 技术或手套箱实现。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（ ^1H NMR、 ^{13}C NMR）、质谱（MS）和高效液相色谱（HPLC）多重验证，确保结构准确性与纯度达标。安全数据表明，该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合危险化学品管理条例，建议通过专业机构进行无害化处置。

（注：实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表（MSDS）并遵循实验室安全规程。）