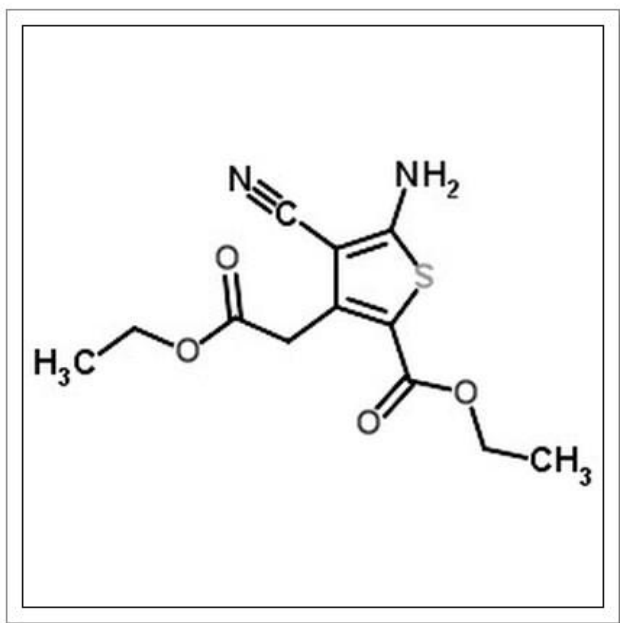


5-氨基-4-氰基-3-(2-乙氧基羰甲基)噻吩-2-羧酸乙酯

5-Amino-4-cyano-3-(2-ethoxycarbonylmethyl) thiophene-2-carboxylic Acid Ethyl Ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Amino-4-cyano-3-(2-ethoxycarbonylmethyl) thiophene-2-carboxylic Acid Ethyl Ester
中文名称	5-氨基-4-氰基-3-(2-乙氧基羰甲基)噻吩-2-羧酸乙酯
CAS 号	58168-20-0
分子式	C12H14N2O4S
分子量	282.316
纯度	>96%

产品说明

5-氨基-4-氰基-3-(2-乙氧基羰甲基)噻吩-2-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为噻吩类衍生物，化学名称为 5-Amino-4-cyano-3-(2-ethoxycarbonylmethyl)thiophene-2-carboxylic Acid Ethyl Ester，CAS 号为 58168-20-0。其分子式为 C₁₂H₁₄N₂O₄S，分子量 282.316，纯度经 HPLC 检测确认 > 96%。该化合物常温下呈白色至淡黄色结晶粉末，具有特定的噻吩环结构，含氨基、氰基和双酯基团，赋予其独特的化学反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能杂环化合物，其分子中的氨基和氰基可作为活性位点参与亲核取代反应，而酯基则易发生水解或酯交换反应。该结构在药物化学中具有特殊价值，是构建抗肿瘤、抗菌类先导化合物的关键中间体。其噻吩骨架与生物体内多种酶的作用位点具有结构相似性，在生物活性分子设计中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：医药研发中作为 EGFR 抑制剂、激酶抑制剂的合成砌块；材料科学中用于制备有机半导体材料前体；农业化学中用于新型杀虫剂开发。具体用途包括但不限于：作为 Suzuki 偶联反应的底物、构建稠环体系的起始原料、以及功能化聚合物的单体修饰剂。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20℃、避光、干燥惰性气体环境下长期储存，开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温并保持干燥，避免与强氧化剂、强酸强碱接触。溶解性测试表明其在 DMSO、DMF 中溶解度 > 50mg/mL，建议先用极性有机溶剂预溶后再加入水相体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，批次间差异 < 2%。安全数据表明其急性毒性 LD₅₀ > 500mg/kg（大鼠经口），操作时需佩戴防护手套及护目镜。如接触皮肤，应

立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，建议通过专业机构进行无害化处理。