

methyl 5-nitrothiophene-2-carboxylate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 5-nitrothiophene-2-carboxylate
产品目录号	
CAS 号	5832-01-9
分子式	C6H5N04S
分子量	187.173
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

甲基 5-硝基噻吩-2-羧酸酯 (methyl 5-nitrothiophene-2-carboxylate) 是一种重要的有机合成中间体, 化学式为 $C_6H_5NO_4S$, 分子量为 187.173。该化合物为淡黄色至黄色结晶或粉末, CAS 号为 5832-01-9, 纯度通常高于 96%。其结构中包含硝基和酯基官能团, 赋予其较高的反应活性, 尤其在亲核取代和环化反应中表现突出。该产品易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和丙酮, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻吩类衍生物, 该化合物在药物化学和材料科学中具有广泛的应用潜力。硝基的存在使其可作为电子受体, 参与多种还原反应, 而酯基则便于进一步水解或衍生化。在生物活性分子合成中, 它是构建抗菌、抗肿瘤化合物的重要砌块, 尤其在杂环类药物开发中不可或缺。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体、农药合成及功能材料研发。在医药领域, 常用于合成抗感染和抗炎药物的核心结构; 在农药工业中, 可作为杀虫剂或杀菌剂的前体。此外, 其共轭结构使其在有机光电材料 (如 OLED 或半导体材料) 的合成中具有独特价值。实验室中亦用于研究噻吩类化合物的反应机理。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护, 避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水有机溶剂, 反应条件应避免强酸强碱环境以防酯基水解。

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)。其急性毒性数据为 LD_{50} (大鼠经口) > 2000 mg/kg, 但仍需按有害化学品规范处理。操作时需佩戴

防护手套、护目镜及防尘口罩，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地环保法规，不可随意丢弃。