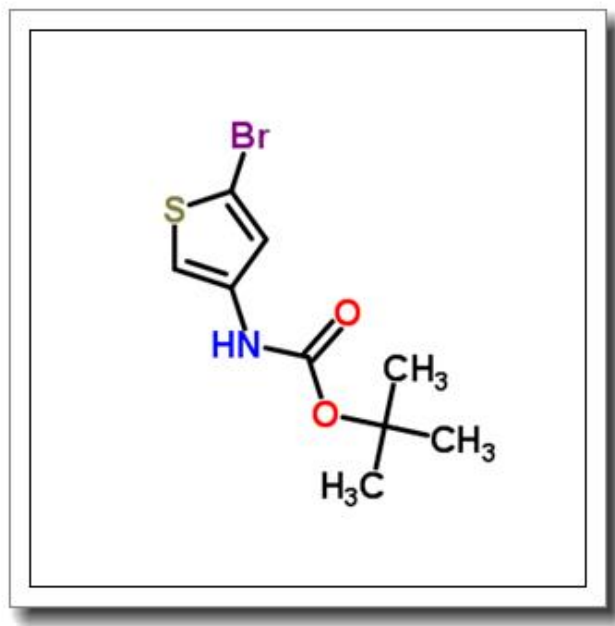


2-溴-4-(N-叔丁氧羰基氨基)噻吩

tert-butyl N-(5-bromothiophen-3-yl)carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl N-(5-bromothiophen-3-yl)carbamate
中文名称	2-溴-4-(N-叔丁氧羰基氨基)噻吩
CAS 号	494833-75-9
分子式	C ₉ H ₁₂ BrN ₀ O ₂ S
分子量	278.166
纯度	≥96%

产品说明

2-溴-4-(N-叔丁氧羰基氨基)噻吩产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl N-(5-bromothiophen-3-yl)carbamate, CAS 号 494833-75-9, 是一种含溴噻吩衍生物。分子式 C₉H₁₂BrN₀S, 分子量 278.166, 常温下呈白色至类白色结晶粉末。该化合物具有噻吩环与叔丁氧羰基 (Boc) 保护胺基的结构特征, 溴原子的引入显著增强了其反应活性。纯度标准 ≥96% (HPLC), 溶解性测试显示易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为重要的医药中间体, 其分子中的 Boc 保护胺基可在酸性条件下选择性脱除, 而溴原子可作为 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应的活性位点。该结构单元广泛用于构建含噻吩环的杂环化合物, 在激酶抑制剂和 GPCR 调节剂的开发中具有特殊价值。其分子刚性结构有助于提高靶标结合的选择性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域:

- 3.1 创新药物研发: 作为核心片段用于合成抗肿瘤、抗病毒候选化合物
- 3.2 材料科学: 制备有机电致发光材料 (OLED) 的噻吩类前体
- 3.3 农药化学: 合成新型杀虫剂和杀菌剂的中间体
- 3.4 学术研究: 用于金属催化偶联反应机理研究的模型底物

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体保护的密闭容器中, 建议温度 -20°C 至 4°C, 避光防潮。开封后建议充氮保存, 避免反复冻融。使用前需室温平衡至少 30 分钟, 称量应在干燥环境下进行。反应投料时建议先进行惰性气体置换, 与强氧化剂、强酸类物质分开存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证, 批号关联完整分析证书 (COA)。安全数据

符合 GHS 标准:

- 5.1 危害分类: 皮肤致敏物 (Category 1B), 吞咽有害 (Category 4)
- 5.2 防护措施: 操作时需佩戴化学防护手套、护目镜及防尘口罩
- 5.3 应急处理: 接触皮肤立即用大量肥皂水冲洗, 眼睛接触需用生理盐水冲洗 15 分钟
- 5.4 废弃物处置: 按危险化学品规范处理, 不可直接排入下水道

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。建议使用者具备有机合成实验技能, 并在通风良好的化学通风橱中操作。