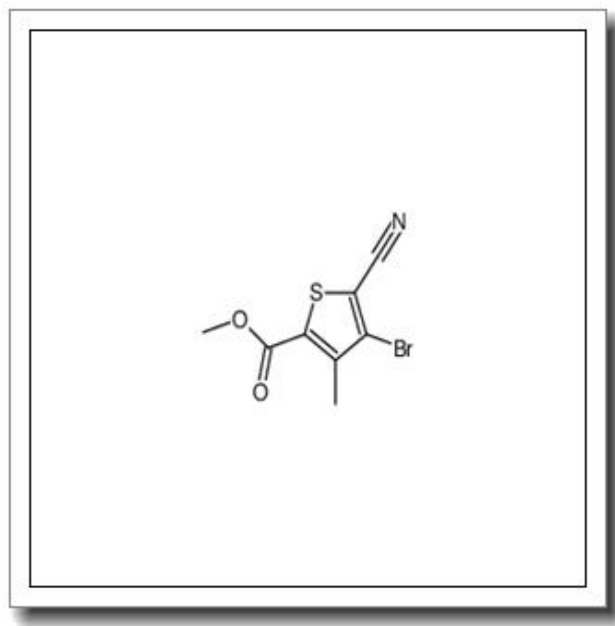


4-溴-5-氰基-3-甲基-2-噻吩甲酸甲酯

Methyl 4-bromo-5-cyano-3-methylthiophene-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-bromo-5-cyano-3-methylthiophene-2-carboxylate
中文名称	4-溴-5-氰基-3-甲基-2-噻吩甲酸甲酯
CAS 号	648412-55-9
分子式	C ₈ H ₆ BrN ₀ O ₂ S
分子量	260.108
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-溴-5-氰基-3-甲基-2-噻吩甲酸甲酯 (Methyl 4-bromo-5-cyano-3-methylthiophene-2-carboxylate) 是一种噻吩类衍生物，化学式为 $C_8H_6BrNO_2S$ ，分子量为 260.108，CAS 号为 648412-55-9。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有噻吩环结构，同时含有溴、氰基和甲酯基等活性官能团，使其在有机合成中表现出较高的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为噻吩类中间体，在药物化学和材料科学领域具有重要价值。其结构中的溴和氰基可作为反应位点，参与偶联、取代等反应，用于构建复杂杂环体系。此外，噻吩骨架在生物活性分子中广泛存在，使得该化合物成为合成抗菌、抗肿瘤等药物先导物的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体：用于合成含噻吩结构的药物分子，如抗炎、抗病毒化合物。
- 材料科学：作为有机半导体或光电材料的合成前体，应用于 OLED 或太阳能电池领域。
- 农药研发：参与构建具有生物活性的噻吩类农药分子。
- 学术研究：作为标准品或反应底物，用于探索新型有机反应机理。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件：需避光、密封保存于干燥阴凉处，建议温度 $2-8^{\circ}C$ ，长期存放建议充惰性气体保护。
- 使用建议：操作时佩戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂，建议在通风橱中配制溶液。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并提供核磁 (NMR) 和质谱 (MS) 数据以验证结构。

- 安全信息: 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 可能引起过敏反应。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

(全文共 436 字)