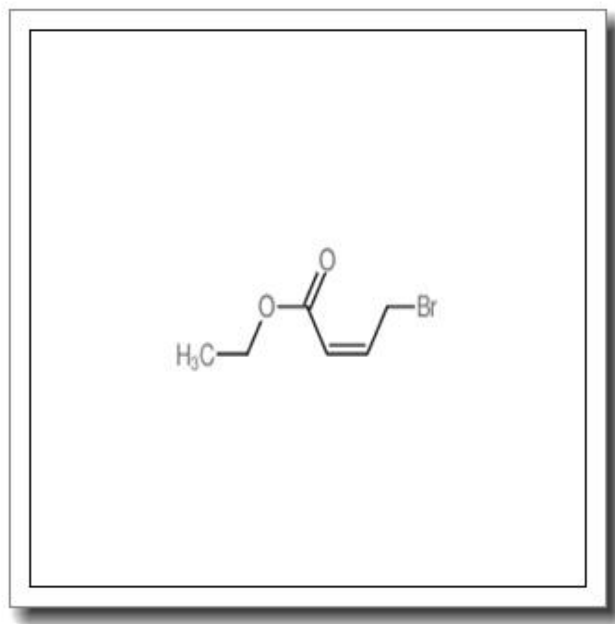


4-溴巴豆酸乙酯

ethyl (E)-4-bromobut-2-enoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl (E)-4-bromobut-2-enoate
中文名称	4-溴巴豆酸乙酯
CAS 号	6065-32-3
分子式	C ₆ H ₉ BrO ₂
分子量	193.038
纯度	≥ 96%

产品说明

4-溴巴豆酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴巴豆酸乙酯 (ethyl (E)-4-bromobut-2-enoate) 是一种含溴不饱和酯类化合物, 化学式为 $C_6H_9BrO_2$, 分子量 193.038。其 CAS 号为 6065-32-3, 常温下为无色至淡黄色液体, 具有酯类特征气味。该化合物结构中包含 α, β -不饱和酯键和溴取代基, 使其兼具亲电性和反应多样性。产品纯度 $\geq 96\%$, 需避光保存以避免光敏反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为有机合成中的重要中间体, 4-溴巴豆酸乙酯的溴原子可作为活性位点参与亲核取代反应, 而双键能发生加成或环化反应。其在生物活性分子合成中具有显著价值, 例如用于构建杂环化合物或作为迈克尔受体参与碳-碳键形成。该试剂在药物研发领域常用于抗生素、抗肿瘤药物的结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药化学中, 本品用于合成 β -氨基酸衍生物及前列腺素类似物; 在材料科学中可作为聚合物改性单体。具体应用包括: 1) 制备手性催化剂配体; 2) 作为荧光标记物的前体; 3) 参与过渡金属催化交叉偶联反应。实验室中常用于构建四碳合成子, 扩展有机分子骨架。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$, 远离氧化剂和强碱。使用前建议进行氮气置换操作, 开封后需一次性用完或严格密封。实验操作应在通风橱中进行, 避免吸入蒸气或接触皮肤。溶解性测试表明易溶于乙醚、二氯甲烷等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 批号关联 GC-MS 谱图可溯源。危险代码: Xi (刺激性), 安全术语 S26 (接触眼睛立即冲洗)、S36/37 (穿戴防护装备)。运输分类

为 UN1993, III 类危险品。如发生泄漏, 需用惰性吸附材料处理并避免产生火花。
废弃物应作为卤化有机废物处置。