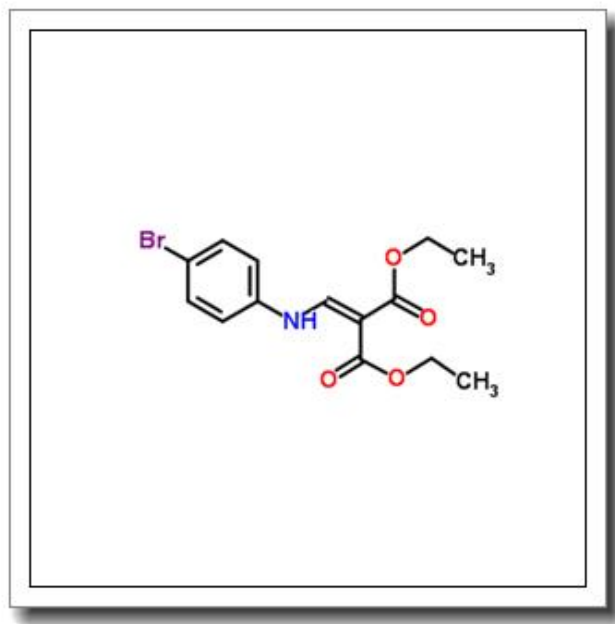


(4-溴苯胺亚甲基)丙二酸二乙酯

(4-bromoanilinomethylene)malonic acid diethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-bromoanilinomethylene)malonic acid diethyl ester
中文名称	(4-溴苯胺亚甲基)丙二酸二乙酯
CAS 号	101937-44-4
分子式	C ₁₄ H ₁₆ BrN ₀₄
分子量	342.185
纯度	≥96%

产品说明

(4-溴苯胺亚甲基)丙二酸二乙酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

(4-溴苯胺亚甲基)丙二酸二乙酯 (化学名称: (4-bromoanilinomethylene)malonic acid diethyl ester) 是一种有机溴化合物, CAS 号为 101937-44-4, 分子式为 $C_{14}H_{16}BrN_2O_4$, 分子量为 342.185。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的酯类气味。其结构中包含溴苯胺基团和丙二酸二乙酯基团, 使其在有机合成中表现出较高的反应活性, 尤其在缩合反应和杂环构建中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为中间体用于合成更复杂的有机分子。其溴原子和活性亚甲基结构使其易于参与亲核取代反应和迈克尔加成反应, 是构建药物分子或功能材料的关键砌块。在医药研发中, 它常用于合成具有生物活性的杂环化合物, 如喹啉类或吲哚类衍生物, 这些结构广泛存在于抗肿瘤、抗炎等药物中。

3. 主要应用领域与具体用途

(4-溴苯胺亚甲基)丙二酸二乙酯主要用于医药中间体、农药合成及材料科学领域。具体用途包括:

- 医药中间体: 参与合成抗疟疾、抗病毒药物前体。
- 农药化学: 用于构建含氮杂环类杀虫剂或杀菌剂的活性骨架。
- 材料科学: 作为功能高分子材料的改性单体, 提升材料的光电性能。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光、密封保存于干燥阴凉处, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}\text{C}$ 。长期存放建议充氮保护以避免氧化。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

产品质量通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$, 并提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 分析报告。安全信息提示: 本品对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护

目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，禁止直接排放至环境中。

(全文约 450 字)