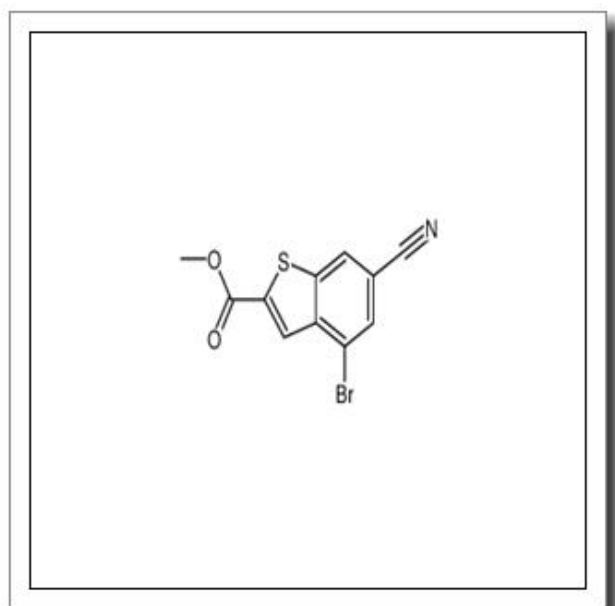


Methyl 4-bromo-6-cyano-1-benzothiophene-2-carboxylate

Methyl 4-bromo-6-cyano-1-benzothiophene-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-bromo-6-cyano-1-benzothiophene-2-carboxylate
中文名称	Methyl 4-bromo-6-cyano-1-benzothiophene-2-carboxylate
CAS 号	753455-45-7
分子式	C ₁₁ H ₆ BrN ₀ O ₂ S
分子量	296.14
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

Methyl 4-bromo-6-cyano-1-benzothiophene-2-carboxylate (CAS 号: 753455-45-7) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{11}H_6BrNO_2S$, 分子量为 296.14。该化合物属于苯并噻吩衍生物, 结构中含有溴、氰基和羧酸甲酯基团, 赋予其独特的化学活性和反应性。其纯度 $\geq 96\%$, 适用于高要求的合成与研发场景。该物质常温下为固体, 需避光保存, 具有良好的溶解性于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并噻吩类化合物, 该产品在药物化学和材料科学中具有重要价值。其结构中的溴原子可作为反应位点参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联), 氰基和酯基则为进一步官能团化提供了修饰可能。这类衍生物常作为关键中间体用于构建具有生物活性的分子, 例如激酶抑制剂或抗肿瘤药物的研发。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中, 它是构建复杂杂环化合物的核心模块, 尤其适用于开发靶向性小分子药物。此外, 在材料科学中, 苯并噻吩骨架可用于设计有机半导体或荧光探针。具体用途包括但不限于: 作为医药中间体、光电材料前体, 以及学术研究中的工具分子。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氩气) 环境中以保持稳定性。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用干燥 DMSO 或甲醇, 溶液需现配现用以防止水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格验证纯度 ($\geq 96\%$), 并提供批次分析证书 (CoA)。安全方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 需避免直接接触。若

不慎吸入或接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学品回收机构处置。