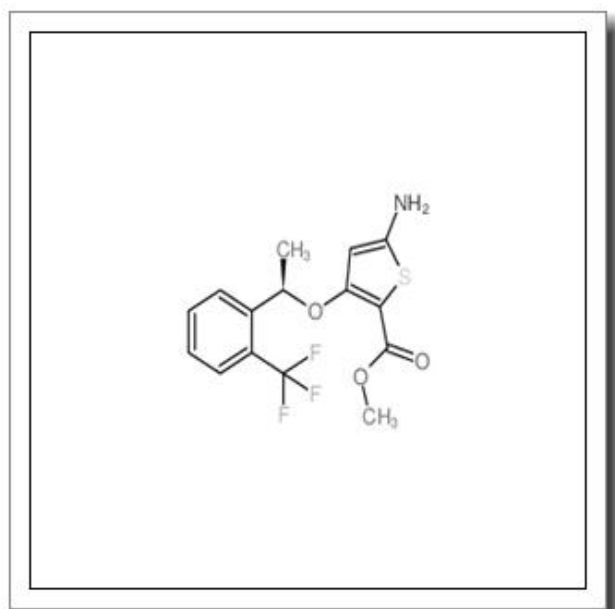


(R)-5-氨基-3-(1-(2-(三氟甲基)苯基)乙氧基)噻吩-2-羧酸甲酯

methyl 5-amino-3-[(1R)-1-[2-(trifluoromethyl)phenyl]ethoxy]thiophene-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 5-amino-3-[(1R)-1-[2-(trifluoromethyl)phenyl]ethoxy]thiophene-2-carboxylate
中文名称	(R)-5-氨基-3-(1-(2-(三氟甲基)苯基)乙氧基)噻吩-2-羧酸甲酯
CAS 号	929039-92-9
分子式	C ₁₅ H ₁₄ F ₃ N ₃ O ₃ S
分子量	345.337
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(R)-5-氨基-3-(1-(2-(三氟甲基)苯基)乙氧基)噻吩-2-羧酸甲酯(英文名: methyl 5-amino-3-[(1R)-1-[2-(trifluoromethyl)phenyl]ethoxy]thiophene-2-carboxylate), CAS 号为 929039-92-9, 分子式为 C₁₅H₁₄F₃N₀S₃, 分子量为 345.337。该化合物是一种具有光学活性的噻吩衍生物, 纯度≥96%, 常温下为白色至类白色结晶或粉末。其结构中的三氟甲基和噻吩环赋予其独特的化学稳定性与反应活性, 适用于多种有机合成与药物研发场景。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体, 在生物化学领域具有重要价值。其噻吩环与氨基的协同作用可参与亲核取代、缩合等反应, 而(R)-构型的手性中心使其在不对称合成中表现出高立体选择性。三氟甲基的引入进一步增强了分子的脂溶性和代谢稳定性, 使其成为药物先导化合物优化的关键结构单元, 尤其在抗炎、抗肿瘤靶点研究中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发与精细化工领域。在药物化学中, 常用于构建蛋白酶抑制剂或 GPCR 调节剂的噻吩骨架; 在材料科学中, 可作为液晶材料或光电功能分子的前体。具体用途包括但不限于:

1. 抗病毒药物(如 HCV NS5A 抑制剂)的合成中间体
2. 手性催化剂配体的修饰基团
3. 荧光探针的母核结构修饰

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度-20° C 至 4° C 长期保存, 短期使用可置于干燥器内室温存放。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜(DMSO)、二氯甲

烷，微溶于甲醇。实验操作需在惰性气体保护下进行，避免强酸强碱环境以防止酯键水解。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制，确保 ee 值（对映体过量） $\geq 98\%$ 。安全数据：

1. 危害标识：H315-H319（造成皮肤和眼刺激）
2. 防护措施：佩戴护目镜、防化手套，通风橱内操作
3. 应急处理：接触皮肤时立即用大量清水冲洗，误食需就医

本产品仅供科研用途，不适用于食品或医疗直接应用。运输按一般化学品规范执行，需附 MSDS 文件。