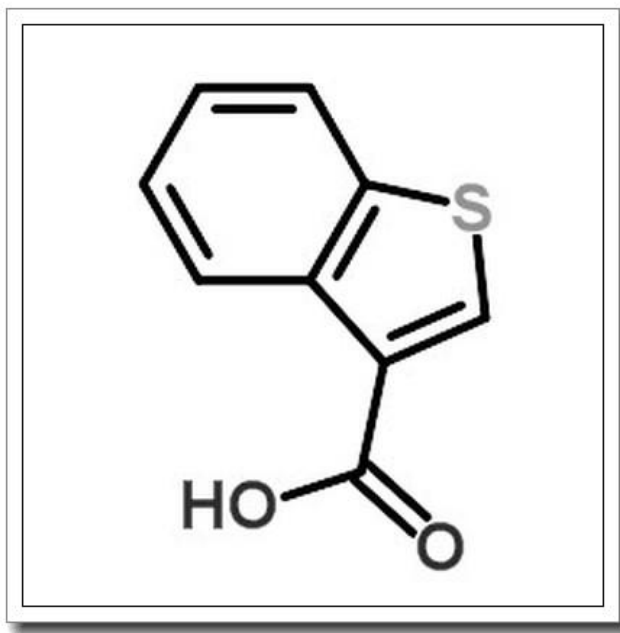


# 1-苯并噻吩-3-羧酸

*1-Benzothiophene-3-Carboxylic Acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Benzothiophene-3-Carboxylic Acid
中文名称	1-苯并噻吩-3-羧酸
CAS 号	5381-25-9
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> S
分子量	178.208
纯度	>96%

## 产品说明

### 1-苯并噻吩-3-羧酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

1-苯并噻吩-3-羧酸 (1-Benzothiophene-3-Carboxylic Acid) 是一种含硫杂环羧酸化合物，化学式为  $C_9H_6O_2S$ ，分子量 178.208，CAS 号为 5381-25-9。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，具有典型的芳香杂环结构和羧酸官能团。其熔点为 210-215°C，可溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水。苯并噻吩骨架赋予其独特的电子分布特性，使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯并噻吩类衍生物的核心结构，该化合物可通过羧基进行酯化、酰胺化等反应，是构建药物活性分子的关键中间体。其杂环结构能够模拟生物体内天然芳香族化合物的空间构型，常用于酶抑制剂或受体配体的设计。在生物医药领域，苯并噻吩骨架常与抗炎、抗肿瘤等活性相关，因此本产品在创新药物研发中具有广泛的应用潜力。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药中间体合成、材料科学及有机化学研究。具体用途包括：作为非甾体抗炎药（如舒林酸）的合成前体；用于构建光电材料中的  $\pi$  共轭体系；在金属有机框架（MOF）材料中作为配体使用。此外，其衍生物可用于开发抗菌剂、抗真菌剂等农用化学品。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中，储存温度 2-8°C。长期存放需充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解时建议使用无水乙醇或 DMF 作为溶剂，反应体系需避免强氧化剂。废弃物需按危险化学品规范处置。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 >96%，水分含量 <0.5%，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数

据表明, 其急性毒性 (LD50 大鼠口服) >2000 mg/kg, 但可能对眼睛和呼吸道产生刺激性。操作时需在通风橱中进行, 如意外接触应立即用大量清水冲洗并就医。提供符合 GHS 标准的 MSDS 报告, 运输分类为非危险品。

注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件进一步验证。