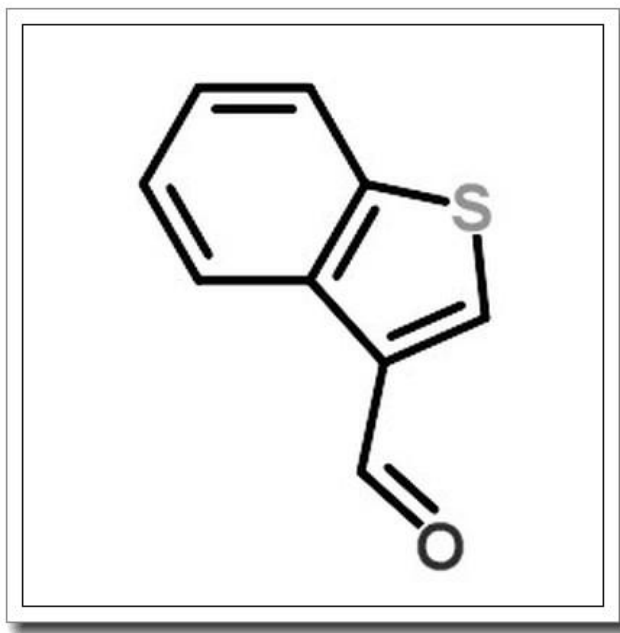


3-甲醛苯并噻吩

1-Benzothiophene-3-carbaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Benzothiophene-3-carbaldehyde
中文名称	3-甲醛苯并噻吩
CAS 号	5381-20-4
分子式	C ₉ H ₆ O ₂ S
分子量	162.208
纯度	>96%

产品说明

1-苯并噻吩-3-甲醛产品说明书

产品概述与化学特性

1-苯并噻吩-3-甲醛 (1-Benzothiophene-3-carbaldehyde) 是一种重要的芳香杂环化合物, 化学式为 C₉H₆O₂S, 分子量 162.208。该物质常温下呈现白色至淡黄色结晶粉末, CAS 登录号为 5381-20-4。其结构中同时含有苯并噻吩骨架和活性醛基官能团, 使其兼具芳香性和反应活性。产品纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 熔点为 72-75°C, 易溶于有机溶剂如乙醇、二氯甲烷, 微溶于水。

生物化学功能与重要性

作为苯并噻吩类衍生物的关键中间体, 其醛基可参与缩合、加成等多种有机反应。在生物活性分子构建中, 该化合物是合成抗炎、抗肿瘤药物的重要药效团。其分子结构中的硫原子和芳香体系赋予电子转移特性, 在材料科学领域具有特殊价值。

主要应用领域与具体用途

医药领域: 用于合成蛋白激酶抑制剂、5-脂氧合酶抑制剂等药物中间体, 特别在抗阿尔茨海默症药物研发中应用广泛。

材料科学: 作为有机半导体材料的合成前体, 用于制备光电功能材料。

化学合成: 作为醛基供体参与 Suzuki 偶联、Knoevenagel 缩合等关键反应。

分析检测: 用作 HPLC 检测硫化物时的衍生化试剂。

储存条件与使用建议

储存条件: 需避光密封保存于 2-8°C 干燥环境中, 建议充氮保护。长期储存应置于惰性气体氛围下。

使用建议: 开封后建议一次性使用完毕。称量时需在干燥环境下操作, 避免吸湿。

反应投料建议在氮气保护下进行, 因其醛基对氧气敏感。

质量控制与安全信息

质量控制: 通过 GC-MS 和 HPLC 双重验证, 批次间纯度差异 <1%。水分含量控制在 0.5% 以下, 重金属残留符合 USP 标准。

安全信息: 该物质对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。皮肤接触后需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵守危险化学品处置规范, 不可直接排入下水系统。安全数据表 (MSDS) 备案。