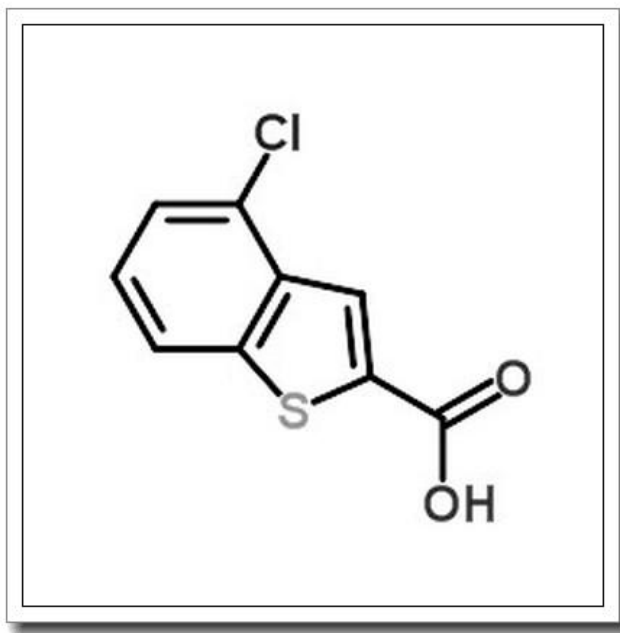


# 4-氟-1-苯并噻吩-2-羧酸

*4-chloro-1-benzothiophene-2-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-chloro-1-benzothiophene-2-carboxylate
中文名称	4-氟-1-苯并噻吩-2-羧酸
CAS 号	23967-57-9
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> ClO <sub>2</sub> S
分子量	212.653
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-氯-1-苯并噻吩-2-羧酸酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-氯-1-苯并噻吩-2-羧酸酯（化学名称：4-chloro-1-benzothiophene-2-carboxylate）是一种重要的杂环化合物，CAS 号为 23967-57-9，分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>5</sub>ClO<sub>2</sub>S，分子量为 212.653。该化合物以苯并噻吩为母核，在 2 位引入羧酸酯基团，4 位由氯原子取代，形成具有特定电子效应的芳香杂环结构。其纯度标准为 >96%，外观通常为白色至类白色结晶性粉末，可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，但在水中溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯并噻吩类衍生物，该化合物因其独特的结构特征，在药物化学和材料科学领域具有显著价值。氯原子的引入增强了分子的亲电性，而羧酸酯基团提供了进一步功能化修饰的位点，使其成为合成抗炎、抗肿瘤或抗菌活性分子的关键中间体。此外，苯并噻吩骨架本身是多种生物活性分子的核心结构，例如某些激酶抑制剂和 GPCR 调节剂。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中，它可作为构建块用于合成更复杂的苯并噻吩类化合物，例如用于开发新型抗病毒或抗癌先导化合物。在材料科学中，其衍生物可能应用于有机半导体或荧光材料的制备。具体实验用途包括但不限于：作为偶联反应的底物、通过水解反应转化为羧酸、或作为金属催化反应的配体前体。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存，温度控制在 2-8° C 以保持长期稳定性。开封后需充入惰性气体（如氮气）密封保存，避免吸湿和氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜及实验服，在通风橱中操作。溶解时优先选用无水级溶剂以减少副反应风险。若需长期保存溶液状态，建议分装后冷冻（-20° C）并避免反复冻融。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度>96%，批次间质量稳定。潜在危害包括皮肤刺激性（类别 2）和眼损伤风险（类别 1），操作时需严格遵守 GHS 标准。安全数据表（SDS）中已标明其急性毒性数据（如 LD50）和生态毒性信息。废弃处理需遵循当地法规，建议通过专业化学品回收机构处置。如发生泄漏，需用惰性吸附材料覆盖后收集，避免直接接触。

注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请结合最新文献评估具体实验条件。