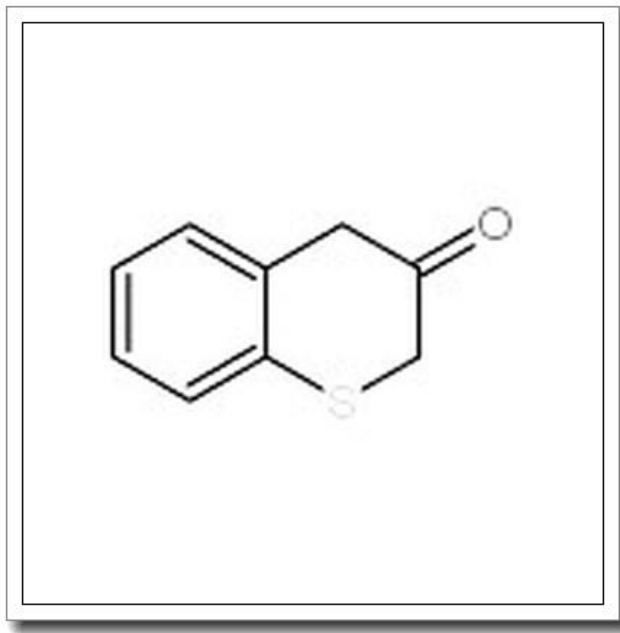


硫代苯并二氢吡喃-3-酮

4H-thiochromen-3-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	4H-thiochromen-3-one
中文名称	硫代苯并二氢吡喃-3-酮
CAS 号	16895-58-2
分子式	C ₉ H ₈ O ₂ S
分子量	164.224
纯度	>96%

产品说明

4H-硫代苯并二氢吡喃-3-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4H-硫代苯并二氢吡喃-3-酮 (4H-thiochromen-3-one) 是一种含硫杂环化合物，化学式为 C₉H₈O₂S，分子量为 164.224，CAS 号为 16895-58-2。该化合物以黄色至浅棕色结晶或粉末形式存在，纯度高于 96%。其结构特征为苯并二氢吡喃骨架中引入硫原子和酮基团，赋予其独特的化学性质，包括良好的热稳定性和适度的极性，可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO)。

2. 生物化学功能与重要性

作为硫杂环化合物的重要代表，4H-硫代苯并二氢吡喃-3-酮在生物化学研究中具有显著意义。其结构中的硫原子和羰基可作为活性位点参与亲核反应或金属配位，适用于酶抑制机制研究和药物分子设计。此外，该类化合物在天然产物合成中常作为关键中间体，用于构建具有生物活性的复杂分子骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。在药物化学中，它是合成抗肿瘤、抗菌及抗炎先导化合物的关键砌块。在有机合成中，可用于构建含硫杂环体系或作为光敏材料的前体。具体实验用途包括但不限于：作为配体参与催化反应、用于荧光探针的修饰、以及作为激酶抑制剂的模板分子。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存，长期储存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮，避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，配制溶液需现配现用，避免长时间暴露于空气中。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥ 96%，批次间差异控制在 ± 1% 以内。安全数据表明，其急性毒性 (LD₅₀) 为 500 mg/kg (大鼠口服)，属于刺激性物质，接触皮肤或眼睛需

立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

（注：实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并严格遵循实验室安全规程。）