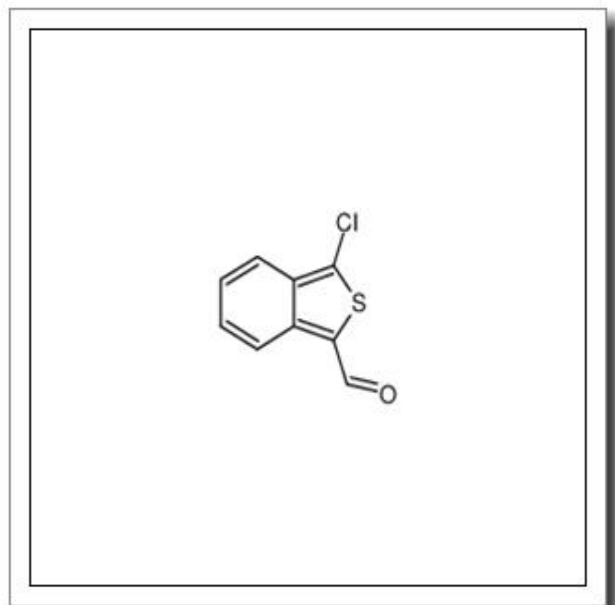


1-chloro-3-formylisothianaphthene

1-chloro-3-formylisothianaphthene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-chloro-3-formylisothianaphthene
中文名称	1-chloro-3-formylisothianaphthene
CAS 号	136132-56-4
分子式	C ₉ H ₅ ClO _S
分子量	196.653
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-chloro-3-formylisothianaphthene (化学名称: 1-氯-3-甲酰基异硫茛, CAS 号: 136132-56-4) 是一种有机硫化合物, 分子式为 C_9H_5ClOS , 分子量为 196.653。该化合物以淡黄色至浅棕色结晶或粉末形式存在, 纯度不低于 96%。其结构中包含氯代基团和甲酰基, 赋予其独特的反应活性, 尤其在亲电取代和缩合反应中表现突出。该化合物在有机溶剂如二氯甲烷、乙醇和 DMF 中具有较好的溶解性, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

1-chloro-3-formylisothianaphthene 作为一种重要的中间体, 在有机合成和药物化学领域具有广泛的应用价值。其甲酰基可作为活性位点参与多种缩合反应, 而氯代基团则提供了进一步官能团化的可能性。该化合物在构建杂环化合物和功能化芳香体系中表现出色, 尤其在合成具有生物活性的分子 (如抗肿瘤或抗菌药物) 中扮演关键角色。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成噻吩类衍生物的重要前体, 可用于开发新型抗炎、抗病毒或抗肿瘤药物。在材料科学中, 其结构特性使其成为制备有机光电材料 (如有机发光二极管 OLED 或半导体材料) 的潜在候选者。此外, 它还可用作有机合成中的交联剂或催化剂配体。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。储存温度应控制在 2-8°C, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在化学通风橱中进行称量和反应操作。开封后应尽快使用, 剩余产品需严格密封保存。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。可能存在的杂质包括未反应的

原料或同系物。安全数据表明，该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应避免接触。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物需按照当地法规处理，不可直接排入下水道。运输时需分类为危险化学品，并符合相关国际标准（如 GHS 分类）。