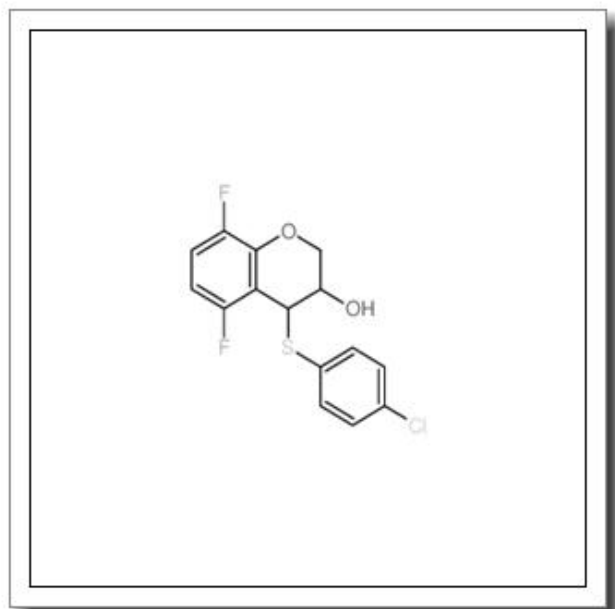


4-((4-氯苯基)硫代)-5,8-二氟苯并二氢吡喃-3-醇

4-(4-chlorophenyl)sulfanyl-5,8-difluoro-3,4-dihydro-2H-chromen-3-ol



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(4-chlorophenyl)sulfanyl-5,8-difluoro-3,4-dihydro-2H-chromen-3-ol
中文名称	4-((4-氯苯基)硫代)-5,8-二氟苯并二氢吡喃-3-醇
CAS 号	944944-61-0
分子式	C ₁₅ H ₁₁ ClF ₂ O ₂ S
分子量	328.761
纯度	≥96%

产品说明

4-((4-氯苯基)硫代)-5,8-二氟苯并二氢吡喃-3-醇产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(4-chlorophenyl)sulfanyl-5,8-difluoro-3,4-dihydro-2H-chromen-3-ol, CAS 号为 944944-61-0, 分子式为 C₁₅H₁₁ClF₂O₂S, 分子量为 328.761。其为白色至类白色结晶性粉末, 纯度≥96%, 结构中含有苯并二氢吡喃骨架、氯苯硫醚基团及二氟取代基, 具有显著的疏水性和稳定性, 可溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇等, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过硫醚键和氟原子的引入, 表现出独特的电子效应和空间位阻, 可作为酶抑制剂或受体调节剂的核心结构。其苯并二氢吡喃醇结构可能参与氧化还原反应, 在生物体内调控信号通路。在药物化学中, 此类结构常用于设计抗炎、抗肿瘤或中枢神经系统活性分子, 具有潜在的药理活性开发价值。

3. 主要应用领域与具体用途

目前主要应用于医药研发领域, 作为中间体用于合成小分子靶向药物, 尤其是针对蛋白激酶或 GPCR 受体的抑制剂。在学术研究中, 可用于探索氟代芳香族化合物的代谢途径或作为荧光标记物的前体。工业上可能用于特种材料的功能化修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议避光密封保存于-20℃干燥环境中, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在惰性气氛(如氮气)下操作, 避免反复冻融。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液建议现配现用。操作时佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%, MS 和 NMR 验证结构。安全数据表明其对眼睛和皮肤有刺激性, 吸入或误服可能有害, 需遵循 GHS 分类处理(危险代码: H315-H319-H335)。废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地法规。

注: 以上信息基于现有研究数据, 具体应用需进一步实验验证。