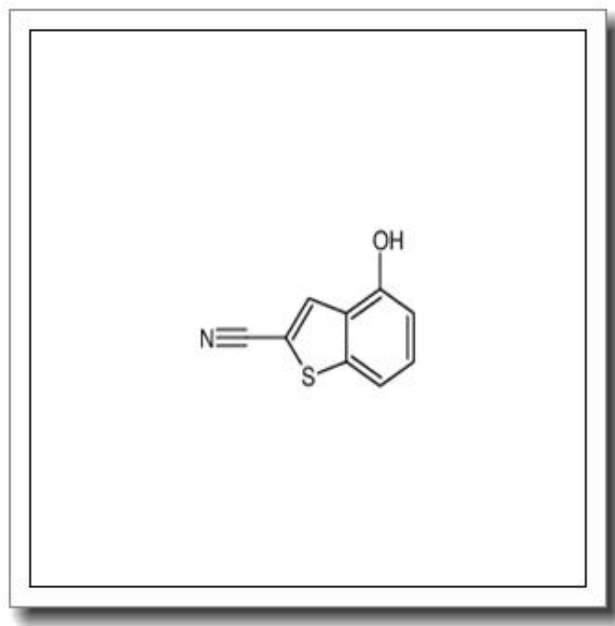


4-羟基苯并[b]噻吩-2-甲腈

4-Hydroxy-1-benzothiophene-2-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Hydroxy-1-benzothiophene-2-carbonitrile
中文名称	4-羟基苯并[b]噻吩-2-甲腈
CAS 号	476199-30-1
分子式	C ₉ H ₅ NOS
分子量	175.207
纯度	≥96%

产品说明

4-羟基苯并[b]噻吩-2-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-羟基苯并[b]噻吩-2-甲腈 (CAS 号 476199-30-1) 是一种含硫杂环化合物, 分子式为 C_9H_5NOS , 分子量 175.207。该物质为白色至淡黄色结晶粉末, 具有特征性芳香气味, 常温下稳定。其结构中同时包含羟基、氰基和苯并噻吩骨架, 使其兼具亲水性和疏水性, 在有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO 中具有良好的溶解性。纯度标准 $\geq 96\%$, 可通过 HPLC 和熔点测定 (文献值约 $210-215^\circ\text{C}$) 进行验证。

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电子效应和空间位阻, 在药物化学中常作为关键中间体。羟基和氰基的协同作用使其能够参与多种偶联反应和环化反应, 特别是作为激酶抑制剂和 GPCR 调节剂的构建模块。其分子极性特征也使其在跨膜传输研究中具有参考价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于合成抗肿瘤药物 (如蛋白激酶抑制剂) 和中枢神经系统药物前体。材料科学中可用于制备有机光电材料的共轭骨架。实验室常用作:

- 小分子探针的合成原料
- 金属有机框架 (MOF) 的功能化配体
- 荧光标记物的修饰基团

典型使用浓度为 $1-10\text{mM}$, 建议反应温度控制在 $0-80^\circ\text{C}$ 范围。

4. 储存条件与使用建议

长期储存应置于惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 温度 -20°C 避光保存, 有效期 36 个月。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。使用前需在干燥环境下平衡至室温, 称量时需佩戴防尘口罩和丁腈手套。工作浓度配制推荐使用无水 DMF 作为溶剂, 若出现轻微变色不影响使用效能, 但出现明显结块应停止使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和 NMR 双重验证, 批次间纯度偏差 < 1.5%。潜在危害包括:

- 皮肤接触可能引起轻微刺激
- 吸入粉尘可能导致呼吸道不适
- 遇强氧化剂可能发生剧烈反应

应急处理: 接触皮肤立即用大量清水冲洗 15 分钟, 眼睛接触需用生理盐水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废料处理, 符合当地环保法规。研发用途仅限实验室环境, 禁止用于食品或化妆品领域。