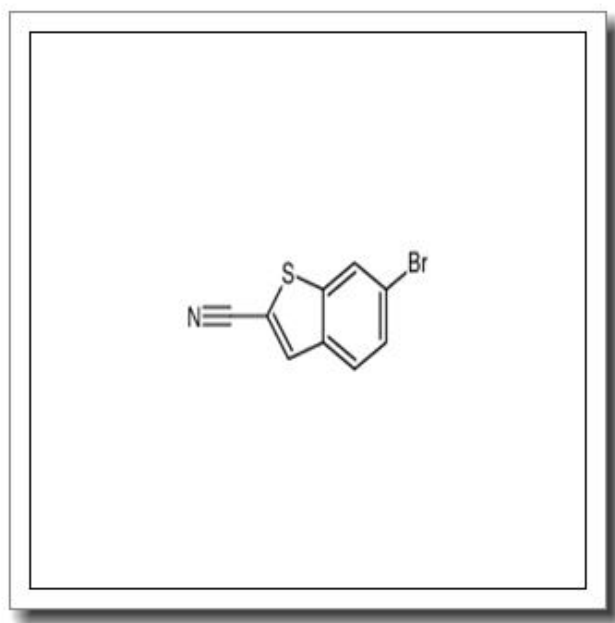


6-bromo-1-benzothiophene-2-carbonitrile

6-bromo-1-benzothiophene-2-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-bromo-1-benzothiophene-2-carbonitrile
中文名称	6-bromo-1-benzothiophene-2-carbonitrile
CAS 号	1190198-24-3
分子式	C ₉ H ₄ BrNS
分子量	238.104
纯度	≥ 96%

产品说明

6-溴-1-苯并噻吩-2-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-溴-1-苯并噻吩-2-甲腈 (6-bromo-1-benzothiophene-2-carbonitrile) 是一种含溴取代基的苯并噻吩衍生物，化学式为 C_9H_4BrNS ，分子量 238.104，CAS 号为 1190198-24-3。本品为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有典型的芳香杂环结构特征。溴原子的引入增强了分子的反应活性，而氰基官能团为其提供了进一步的修饰位点，使其成为有机合成中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在药物化学和材料科学领域具有显著价值。苯并噻吩骨架是多种生物活性分子的核心结构，常见于抗炎、抗肿瘤及抗菌药物的研发中。溴原子的存在使其易于通过偶联反应构建复杂分子，而氰基则可能参与氢键形成或作为前体转化为其他官能团（如羧酸或酰胺），因此在靶向药物设计和功能材料开发中具有广泛潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

6-溴-1-苯并噻吩-2-甲腈主要用于以下领域：

- 医药中间体：用于合成小分子抑制剂或激酶调节剂，尤其在抗癌药物开发中表现活跃。
- 材料科学：作为有机发光二极管 (OLED) 或半导体材料的构建单元。
- 学术研究：用于探索苯并噻吩类化合物的结构-活性关系及新型催化反应路径。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于干燥环境中，推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$ ，长期存放建议充入惰性气体保护。使用时应穿戴防护手套、护目镜及实验服，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和部分有机溶剂，但在水溶液中稳定性较差，建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并符合核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 表征标准。

安全数据表明，其急性毒性（LD50）需参考具体实验数据，操作时需在通风橱中进行。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

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。建议用户在首次使用前查阅最新文献或进行小试实验。