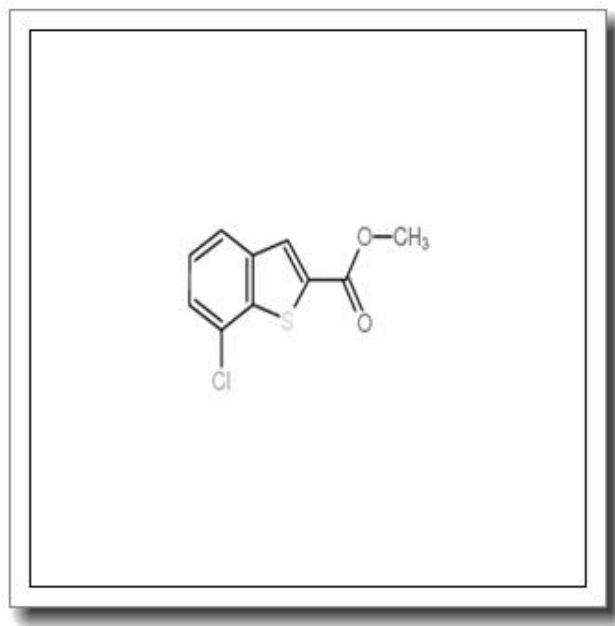


7-氯苯并[b]噻吩-2-羧酸甲酯

Methyl 7-chloro-1-benzothiophene-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 7-chloro-1-benzothiophene-2-carboxylate
中文名称	7-氯苯并[b]噻吩-2-羧酸甲酯
CAS 号	550998-56-6
分子式	C ₁₀ H ₇ ClO ₂ S
分子量	226.679
纯度	≥96%

产品说明

7-氯苯并[b]噻吩-2-羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

7-氯苯并[b]噻吩-2-羧酸甲酯 (Methyl 7-chloro-1-benzothiophene-2-carboxylate) 是一种重要的有机合成中间体，化学式为 $C_{10}H_7ClO_2S$ ，分子量为 226.679。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，CAS 号为 550998-56-6，纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中的苯并噻吩环与氯取代基及羧酸甲酯官能团赋予其独特的化学反应性，适用于多种有机转化反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并噻吩类衍生物，该化合物在药物化学和材料科学中具有显著价值。苯并噻吩骨架常见于生物活性分子中，其结构修饰可影响药物分子的脂溶性、靶点结合能力及代谢稳定性。氯原子的引入进一步增强了其作为电子受体的特性，使其在偶联反应或亲核取代反应中表现优异。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体合成，尤其是抗肿瘤、抗炎及抗菌药物的研发。例如，可作为构建 EGFR 抑制剂或激酶抑制剂的关键片段。此外，在有机光电材料领域，其衍生物可用于制备高性能半导体材料或荧光探针。实验室中亦用作杂环化合物研究的模型分子。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中，温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护，避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性较差。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 需参考具体实验数据，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不

慎接触眼睛，应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：以上说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）