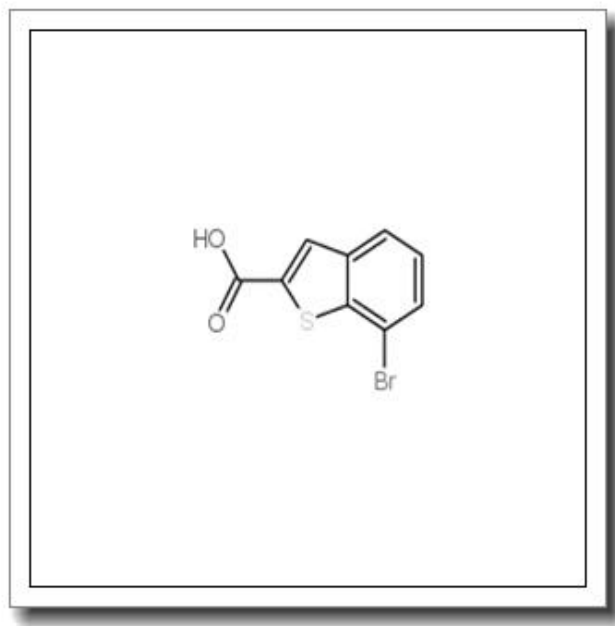


7-溴-1-苯并噻吩-2-羧酸

7-Bromo-1-benzothiophene-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	7-Bromo-1-benzothiophene-2-carboxylic acid
中文名称	7-溴-1-苯并噻吩-2-羧酸
CAS 号	19075-59-3
分子式	C ₉ H ₅ BrO ₂ S
分子量	257.104
纯度	≥96%

产品说明

7-溴-1-苯并噻吩-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

7-溴-1-苯并噻吩-2-羧酸 (CAS 号 19075-59-3) 是一种重要的芳香杂环羧酸衍生物, 化学式为 $C_9H_5BrO_2S$, 分子量 257.104。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有苯并噻吩母核结构, 其 2 号位羧基和 7 号位溴原子赋予其独特的化学反应活性。该物质易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、N,N-二甲基甲酰胺 (DMF) 等极性有机溶剂, 微溶于醇类, 难溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并噻吩类化合物的关键中间体, 7-溴取代结构显著增强了分子的电子亲和性, 使其成为构建复杂生物活性分子的理想模块。羧酸官能团可通过酯化、酰胺化等反应进一步功能化, 在药物化学中常用于激酶抑制剂、GPCR 调节剂等靶向药物的结构修饰。其分子中的硫原子和溴原子在金属催化偶联反应中表现出优异的反应活性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为抗肿瘤药物 (如 VEGFR 抑制剂)、抗炎药物及中枢神经系统药物的核心骨架。
- 3.2 材料科学: 用于合成有机电致发光材料 (OLED) 中的电子传输层组分。
- 3.3 农药化学: 作为新型杀虫剂和杀菌剂的中间体。
- 3.4 科研用途: 在有机合成方法学研究中作为标准底物用于 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 应密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照和湿度。长期储存建议充入惰性气体保护。
- 4.2 使用建议: 实验操作需在通风橱中进行, 建议使用干燥手套和防护眼镜。配制

溶液时优先选用无水级溶剂，反应体系需严格除氧处理以获得最佳反应效果。

4.3 运输要求：按危险化学品 B 类包装，避免与氧化剂、强酸强碱混装运输。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 测定纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ ，水分含量 $< 0.5\%$ 。每批次提供完整的 COA（分析证书）和 MSDS（材料安全数据表）。

5.2 安全信息：该产品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如发生接触，立即用大量清水冲洗至少 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品处置法规。

5.3 应急处理：泄漏时使用惰性吸附材料收集，不得使用可燃性吸附剂。火灾时建议使用干粉灭火器或二氧化碳灭火器。

注：本产品仅限科研用途，不适用于医药、食品及家庭用途。具体应用前请务必查阅最新文献资料确认实验方案。