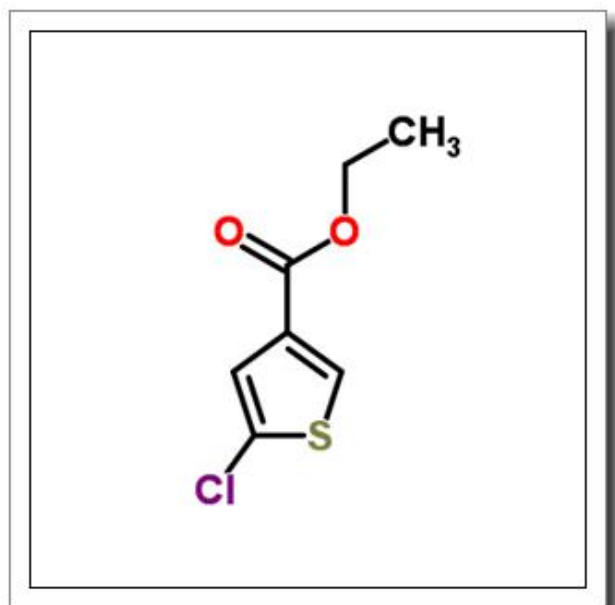


# Ethyl 5-chloro-3-thiophenecarboxylate

*Ethyl 5-chloro-3-thiophenecarboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-chloro-3-thiophenecarboxylate
中文名称	Ethyl 5-chloro-3-thiophenecarboxylate
CAS 号	189331-32-6
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> S
分子量	190.647
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 5-氯-3-噻吩甲酸乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-氯-3-噻吩甲酸乙酯 (Ethyl 5-chloro-3-thiophenecarboxylate, CAS 189331-32-6) 是一种含氯噻吩类有机化合物, 分子式为  $C_7H_7ClO_2S$ , 分子量 190.647。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有特征性酯类气味, 纯度  $\geq 96\%$ 。其结构中噻吩环与氯原子、酯基的协同作用, 使其成为有机合成中重要的中间体, 尤其在杂环化合物构建中表现突出。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过噻吩环的电子离域特性及氯原子的活性位点, 可参与亲核取代、偶联反应等关键步骤。其酯基易于水解或转化, 为羧酸衍生物合成提供灵活路径。在药物化学中, 噻吩骨架是抗菌、抗炎类先导化合物的常见结构单元, 而氯原子的引入进一步增强了分子与生物靶点的相互作用潜力。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

作为精细化工中间体, 本品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 用于构建抗病毒药物 (如 HCV 抑制剂) 的核心片段; 在农药合成中, 可作为杀虫剂或杀菌剂的氯代杂环前体; 此外, 在光电材料领域, 其衍生物可用于有机半导体材料的制备。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处 ( $2-8^{\circ}C$ ), 避免光照与潮湿环境。开封后需充惰性气体保护以防氧化。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 于通风橱中进行称量与反应。与强氧化剂、强碱类物质隔离存放。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 水分含量  $\leq 0.5\%$ , 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 其急性毒性 ( $LD_{50}$ ) 为中等, 对皮肤和眼睛有刺激性。泄漏处理需用惰性

吸附材料覆盖，废液按危险化学品规范处置。建议使用者查阅 MSDS 并遵守当地法规。

注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请进行小试验证。