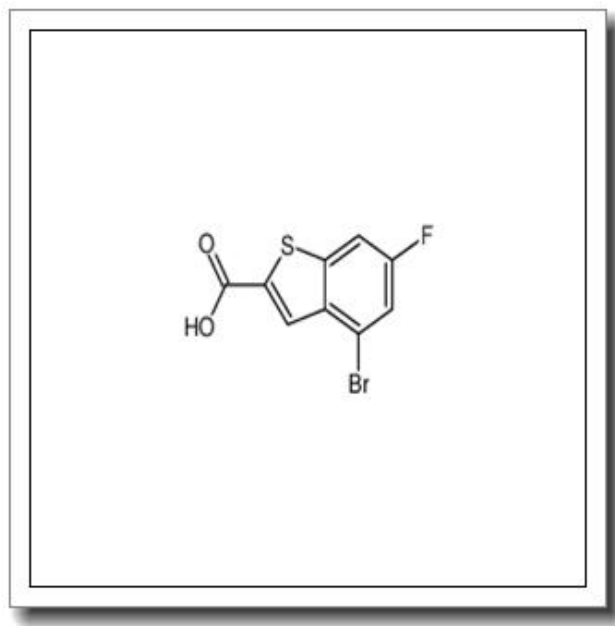


产品_3717

4-Bromo-6-fluoro-1-benzothiophene-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-6-fluoro-1-benzothiophene-2-carboxylic acid
中文名称	产品_3717
CAS 号	826995-60-2
分子式	C ₉ H ₄ BrF ₀ S
分子量	275.094
纯度	≥96%

产品说明

4-溴-6-氟-1-苯并噻吩-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 4-Bromo-6-fluoro-1-benzothiophene-2-carboxylic acid (CAS 号: 826995-60-2), 是一种含溴、氟取代的苯并噻吩羧酸衍生物。分子式为 C₉H₄BrF₀S, 分子量 275.094, 外观通常为白色至类白色结晶性粉末。其结构中苯并噻吩环上的溴和氟取代基赋予其独特的电子效应与空间位阻, 羧酸基团则提供了进一步衍生化的反应位点。纯度 ≥96% (HPLC), 需避光保存以维持稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环芳香化合物, 该分子在药物化学中具有重要价值。苯并噻吩骨架是多种生物活性分子的核心结构, 溴和氟的引入可调节化合物的脂溶性、代谢稳定性及靶标结合能力。其羧酸基团易于与胺类缩合形成酰胺键, 常用于构建激酶抑制剂、抗炎剂或抗肿瘤药物的中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发领域:

- 作为关键中间体用于合成小分子靶向药物, 尤其是针对蛋白激酶或 GPCR 受体的抑制剂。
- 在材料科学中可用于制备有机光电功能材料的修饰单元。
- 实验室研究中可作为荧光探针或生物标记物的前体化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中, 避免与氧化剂、强酸强碱接触。开封后建议充惰性气体保护以延长保质期。

使用建议: 实验操作需在通风橱中进行, 佩戴防护手套及护目镜。溶解性测试显示其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较差, 建议先用少量有机溶剂助溶后再稀释。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次一致性验证，残留溶剂符合 ICH 标准。

安全信息：本品对眼睛、皮肤有刺激性，可能引起呼吸道过敏。安全数据表

(SDS) 编号：PRO-3717-SDS-1.0。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需遵循当地危险化学品管理条例。

(注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。)