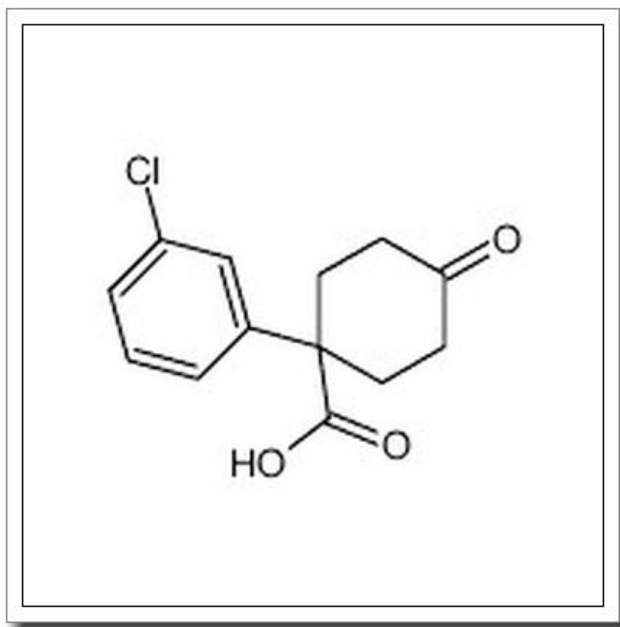


1-(3-氯苯基)-4-氧代环己甲酸

1-(3-chlorophenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3-chlorophenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid
中文名称	1-(3-氯苯基)-4-氧代环己甲酸
CAS 号	887978-71-4
分子式	C ₁₃ H ₁₃ ClO ₃
分子量	252.694
纯度	>96%

产品说明

1-(3-氯苯基)-4-氧代环己甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-(3-氯苯基)-4-氧代环己甲酸（英文名称：1-(3-chlorophenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid）是一种有机化合物，化学式为 $C_{13}H_{13}ClO_3$ ，分子量为 252.694，CAS 号为 887978-71-4。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度高于 96%，具有良好的化学稳定性。其结构特征为环己烷骨架上的 1 位取代 3-氯苯基，4 位为羰基氧代，1 位同时连接羧酸基团，使其兼具芳香性和羧酸的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的医药中间体，其结构中的氯苯基和羧酸基团可参与多种有机合成反应，如酯化、酰胺化或环化反应。氧代环己烷结构在药物设计中常用于构建刚性骨架，增强分子靶向性。其在生物活性分子合成中具有潜在应用价值，可能作为酶抑制剂或受体调节剂的合成前体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域，具体包括：

- 1) 作为抗炎、抗肿瘤或中枢神经系统药物合成的关键中间体；
- 2) 用于构建杂环化合物或手性衍生物，拓展药物分子库；
- 3) 在有机化学研究中作为官能团修饰的模型化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避免光照与潮湿环境，推荐温度范围为 2-8℃。长期保存建议充氮保护。使用时需在干燥通风环境下操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），水溶性较低，建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 USP 标准。安全数据表明：

- 1) 危害标识: H315-H319 (可能造成皮肤和眼睛刺激);
- 2) 防护措施: 佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩;
- 3) 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗, 误入眼睛需用大量清水冲洗并就医。

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考相关文献或咨询专业技术人员。