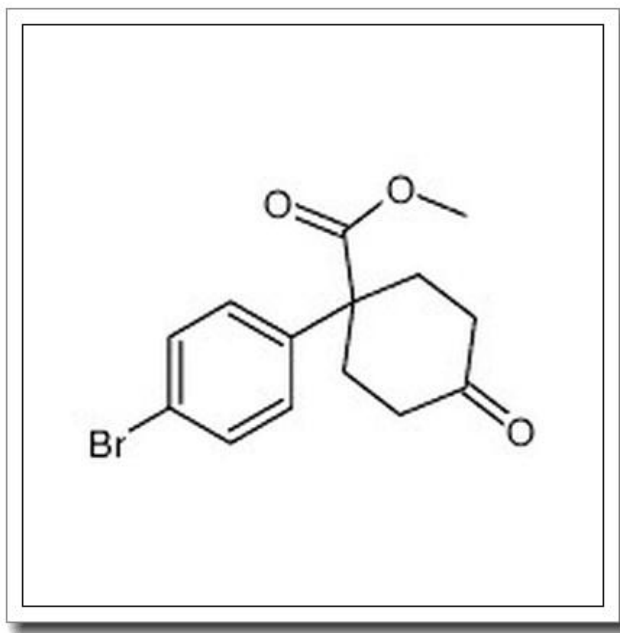


1-(4-溴苯基)-4-氧代环己烷羧酸甲酯

methyl 1-(4-bromophenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 1-(4-bromophenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylate
中文名称	1-(4-溴苯基)-4-氧代环己烷羧酸甲酯
CAS 号	1384265-30-8
分子式	C ₁₄ H ₁₅ BrO ₃
分子量	311.171
纯度	>96%

产品说明

1-(4-溴苯基)-4-氧代环己烷羧酸甲酯产品说明书

产品概述与化学特性

1-(4-溴苯基)-4-氧代环己烷羧酸甲酯（英文名称：methyl 1-(4-bromophenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylate）是一种有机溴化合物，CAS 号为 1384265-30-8，分子式为 C₁₄H₁₅BrO₃，分子量为 311.171。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有典型的酯类和酮类官能团特性。其结构中的溴苯基和环己酮骨架使其在有机合成中表现出较高的反应活性，尤其在构建复杂杂环化合物时具有重要价值。

生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的中间体，在药物化学和材料科学领域具有广泛应用。其分子结构中的溴原子可作为反应位点参与偶联反应（如 Suzuki 偶联），而环己酮部分则可通过还原或缩合反应进一步修饰。在生物活性分子合成中，它常被用于构建具有抗炎、抗肿瘤或中枢神经系统活性的先导化合物。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发：作为关键中间体用于合成靶向药物，尤其是针对 GPCR 受体或激酶抑制剂的开发。
2. 材料科学：参与制备有机光电材料，如 OLED 发光层的前驱体。
3. 学术研究：在有机方法学研究中用于开发新型催化反应或不对称合成策略。
4. 农业化学：潜在应用于高效低毒农药的分子设计。

储存条件与使用建议

1. 储存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中，避光密封保存。
2. 开封后建议充入惰性气体（如氮气）以延长稳定性。
3. 使用前需恢复至室温并充分干燥，避免水分影响反应活性。
4. 在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

质量控制与安全信息

1. 通过 HPLC 和 NMR 双重验证纯度，批次间偏差小于 1%。
2. 急性毒性数据（大鼠口服 LD50）>2000 mg/kg，属于低毒类物质。
3. 安全防护：操作时需佩戴护目镜、丁腈手套和防尘口罩。
4. 废弃物处理：按危险化学品规范处置，禁止直接排入下水道。

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文献报道或咨询专业技术支持。