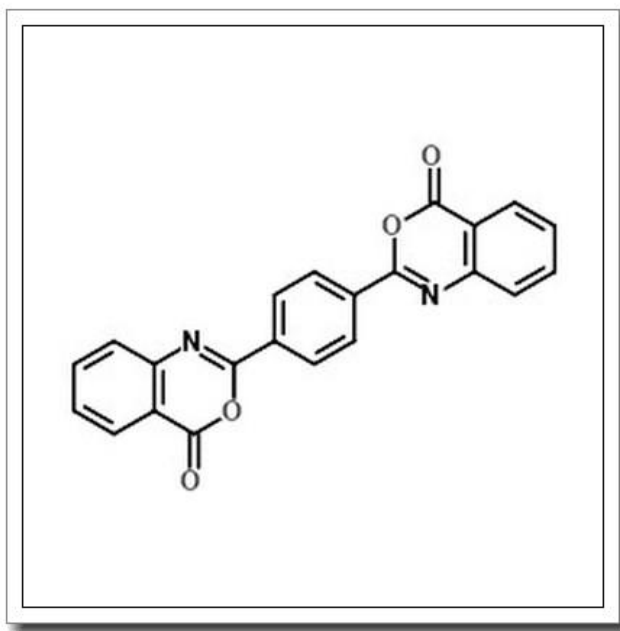


# 2,2'-(1,4-亚苯基)双-4H-3,1-苯并恶嗪-4-酮

*2-[4-(4-oxo-3,1-benzoxazin-2-yl)phenyl]-3,1-benzoxazin-4-one*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | 2-[4-(4-oxo-3,1-benzoxazin-2-yl)phenyl]-3,1-benzoxazin-4-one  |
| 中文名称  | 2,2'-(1,4-亚苯基)双-4H-3,1-苯并恶嗪-4-酮                               |
| CAS 号 | 18600-59-4  |
| 分子式   | C <sub>22</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> |
| 分子量   | 368.342   |
| 纯度    | >96%  |

## 产品说明

2-[4-(4-oxo-3,1-benzoxazin-2-yl)phenyl]-3,1-benzoxazin-4-one 产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 2-[4-(4-oxo-3,1-benzoxazin-2-yl)phenyl]-3,1-benzoxazin-4-one，中文名称为 2,2'-(1,4-亚苯基)双-4H-3,1-苯并恶嗪-4-酮，CAS 号为 18600-59-4。其分子式为 C<sub>22</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>，分子量为 368.342，纯度>96%。该化合物为淡黄色至白色结晶粉末，具有苯并恶嗪类结构的特征性共轭体系，在紫外光区有显著吸收，微溶于常见有机溶剂如 DMSO 和 DMF，难溶于水。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯并恶嗪类衍生物，该化合物可通过其刚性平面结构与生物大分子（如 DNA 或蛋白质）发生  $\pi-\pi$  堆积或氢键相互作用，在药物化学中常作为激酶抑制剂或核酸结合剂的母核结构。其双恶嗪骨架赋予其良好的热稳定性和电子离域能力，在材料科学领域亦具有潜在应用价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品可用于构建抗肿瘤或抗炎药物的先导化合物，尤其针对拓扑异构酶或蛋白激酶靶点。在材料领域，可作为有机发光二极管（OLED）的电子传输层材料前体。实验室中常用于以下场景：

- 新型杂环化合物的合成中间体
- 荧光探针的骨架修饰
- 高分子聚合物的功能单体

### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照及湿度>60%。开封后需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作，溶解推荐使用预脱水的 DMSO（浓度≤10 mM），溶液现配现用。长期储存建议分装并标注开封日期。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，批次间差异<2%。MS 及 NMR 谱图可随 COA 提供。安全提示：可能对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应作为有害化学废料处理，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）