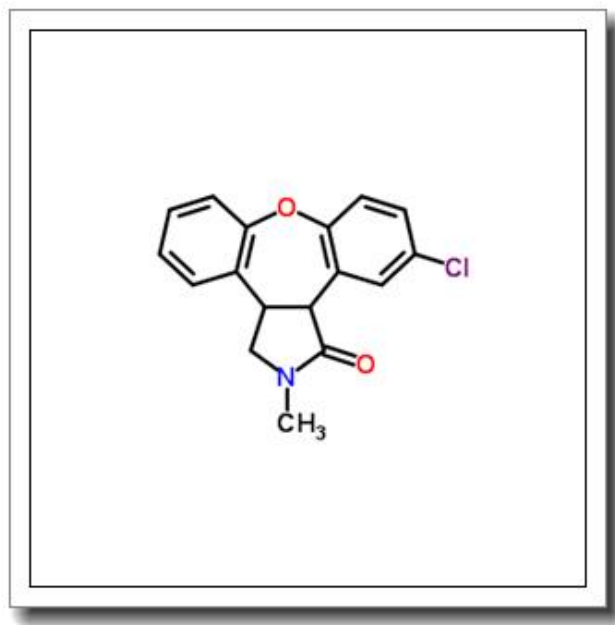


11-Chloro-2-methyl-2,3,3a,12b-tetrahydro-1H-dibenzo[2,3:6,7]oxepino[4,5-c]pyrrol-1-one

11-Chloro-2-methyl-2,3,3a,12b-tetrahydro-1H-dibenzo[2,3:6,7]oxepino[4,5-c]pyrrol-1-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	11-Chloro-2-methyl-2,3,3a,12b-tetrahydro-1H-dibenzo[2,3:6,7]oxepino[4,5-c]pyrrol-1-one
中文名称	11-氯-2-甲基-2,3,3a,12b-四氢-1H-二苯并[2,3:6,7]氧吡啶[4,5-c]吡咯-1-酮
CAS 号	1180843-77-9

分子式	C ₁₇ H ₁₄ C ₁ N ₀ O ₂
分子量	299.752
纯度	≥ 96%

产品说明

11-氯-2-甲基-2, 3, 3a, 12b-四氢-1H-二苯并[2, 3:6, 7]氧杂环庚烯并[4, 5-c]吡咯-1-酮 (CAS 号: 1180843-77-9) 是一种具有复杂多环结构的有机化合物, 分子式为 $C_{17}H_{14}ClN_2O_2$, 分子量为 299.752。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 其结构中包含氯代芳烃和稠合杂环体系, 表现出独特的化学稳定性和生物活性。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于氧杂环庚烯并吡咯酮类衍生物, 其核心结构融合了苯环、氧杂环和吡咯酮骨架。氯原子的引入增强了其电子亲和性, 而甲基修饰可能影响其空间位阻和溶解性。其熔点和溶解度需通过实验进一步测定, 建议在有机溶剂如 DMSO 或 DMF 中溶解使用。

2. 生物化学功能与重要性

作为小分子抑制剂或中间体, 该化合物在药物研发领域具有潜在价值。其结构特征表明可能作用于特定酶或受体, 例如与神经退行性疾病或肿瘤相关的靶点。目前研究多集中于其作为先导化合物的优化潜力, 但具体机制需结合实验数据验证。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药化学和生物有机化学领域:

- 作为药物研发中的关键中间体, 用于合成更复杂的生物活性分子。
- 在激酶或 GPCR 抑制剂筛选中作为候选化合物库的组成部分。
- 用于结构-活性关系 (SAR) 研究, 以探索杂环化合物的构效关系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可置于 $4^{\circ}C$ 环境。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护以避免降解。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解前建议超声处理以提高分散性。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$, 批次间提供 COA (质量分析证书)。其 GHS

分类可能包含刺激性或毒性（具体需依据实验数据），操作时应避免吸入或接触皮肤。废弃物需按危险化学品规范处置。更多安全信息请参考材料安全数据表（MSDS）。

注：以上信息基于现有数据，实际应用前建议进行小规模试验以验证适用性。