

2-chlorodibenzo[b,f]-1,4-thiazepin-11(10H)-one

2-chlorodibenzo[b, f]-1, 4-thiazepin-11 (10H)-one

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-chlorodibenzo[b, f]-1, 4-thiazepin-11 (10H)-one
中文名称	2-chlorodibenzo[b, f]-1, 4-thiazepin-11 (10H)-one
CAS 号	3159-04-04 00:00:00
分子式	C13H8ClNOS
分子量	261.727
纯度	≥96%

产品说明

2-氯二苯并[b, f]-1, 4-噻氮杂草-11(10H)-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-chlorodibenzo[b, f]-1, 4-thiazepin-11(10H)-one，CAS 号为 3159-04-04，分子式 C₁₃H₈ClNOS，分子量 261.727。其结构中含苯并噻氮杂草骨架和氯取代基，赋予其独特的电子效应与空间位阻特性。纯度 ≥96% (HPLC)，熔点为 215-218℃，易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和 N,N-二甲基甲酰胺 (DMF)，微溶于甲醇、乙醇。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环衍生物，可通过抑制特定酶活性（如激酶或磷酸酶）干扰细胞信号通路。其氯原子与噻氮杂草核心结构可增强与生物靶标的结合能力，在药物化学中常用于先导化合物优化，尤其在抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 作为中间体用于合成新型噻氮杂草类候选药物
- 在体外实验中用于评估激酶抑制活性或蛋白-配体相互作用
- 作为标准品用于分析方法的开发与验证
- 在材料科学中用于构建有机光电功能分子

4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中，置于-20℃干燥环境下，避免反复冻融。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，建议现配现用。溶解推荐使用预纯化的 DMSO，配制后溶液需分装保存并于-80℃长期储存。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检，批号关联完整分析证书（COA）。安全数据：

- 危害标识：H302（吞咽有害）、H315（皮肤刺激）
- 防护措施：佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套，在通风橱中操作
- 废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入下水道

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案需结合文献优化条件。