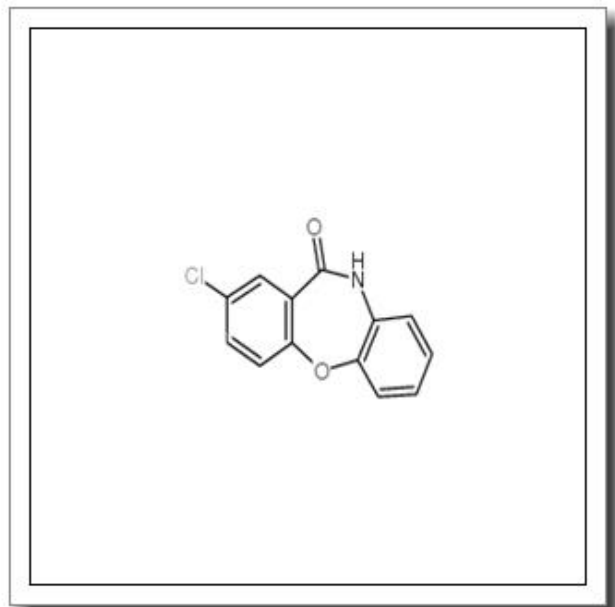


# 2-氯二苯并[b,f][1,4]氧氮杂卓-11(10H)- 酮

*2-Chloro-10, 11-dihydro-11-oxo-dibenzo[b, f][1, 4]oxazepine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-10, 11-dihydro-11-oxo-dibenzo[b, f][1, 4]oxazepine
中文名称	2-氯二苯并[b, f][1, 4]氧氮杂卓-11(10H)-酮
CAS 号	3158-91-6
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	245.661
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-氯二苯并[b, f][1, 4]氧氮杂卓-11(10H)-酮产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-Chloro-10, 11-dihydro-11-oxo-dibenzo[b, f][1, 4]oxazepine, CAS 号为 3158-91-6, 分子式 C<sub>13</sub>H<sub>8</sub>C<sub>1</sub>N<sub>0</sub>O<sub>2</sub>, 分子量 245.661, 是一种高纯度 (≥96%) 的杂环化合物。其结构特征为苯并氧氮杂卓骨架, 在 11 位带有羰基, 2 位被氯原子取代。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有明确的熔点和紫外吸收特性, 需通过 HPLC 或 GC-MS 进行纯度验证。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为氧氮杂卓类衍生物, 该化合物在药物化学中具有显著的生物活性潜力。其结构中的氯原子和羰基可增强分子与靶标蛋白的相互作用, 常用于中枢神经系统药物或抗炎药物的先导化合物开发。在激酶抑制和受体调节研究中表现出特异性, 是探索神经退行性疾病治疗路径的重要中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发领域, 具体用途包括: 作为合成抗精神病药物 (如氯氮平类似物) 的关键中间体; 用于构建 DNA 嵌入剂或拓扑异构酶抑制剂的研究; 在有机发光材料开发中作为电子传输层的前体。实验室级应用需严格控制反应条件, 推荐用量为 0.1-5mmol/L 范围。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭避光容器中, 置于-20℃干燥环境下, 长期保存建议充入惰性气体保护。开封后需在干燥箱中操作, 避免吸湿分解。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 在通风橱中进行称量和溶解。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF, 微溶于甲醇, 不溶于水。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 重金属含量 <10ppm, 符合 USP 级标准。安全数据表明其具有刺激性 (GHS 分类: Eye Irrit. 2), 操作时需避免接触皮肤和黏膜。废

弃物应作为有害化学废物处理，不可直接排放。提供完整的 COA（分析证书）和 MSDS（材料安全数据表），运输分类为 UN2811 6.1 类/PG III。

注：本说明仅限专业研究人员参考，实际应用需结合具体实验方案和法规要求。