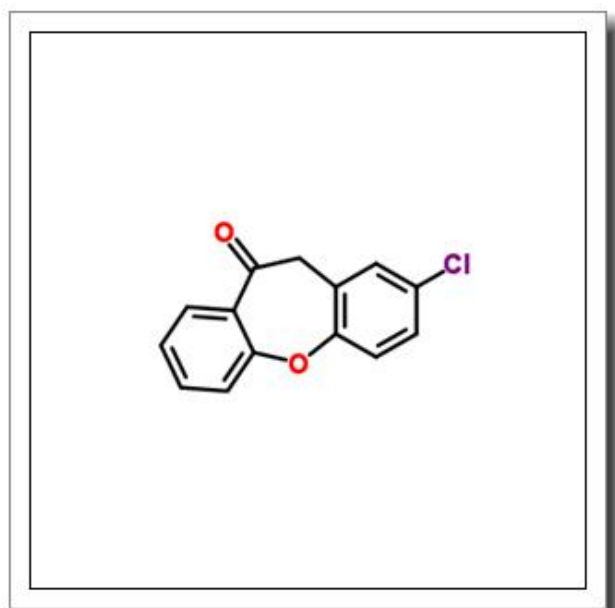


3-chloro-5H-benzo[b][1]benzoxepin-6-one

3-chloro-5H-benzo[b][1]benzoxepin-6-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-chloro-5H-benzo[b][1]benzoxepin-6-one
中文名称	3-chloro-5H-benzo[b][1]benzoxepin-6-one
CAS 号	55595-54-5
分子式	C ₁₄ H ₉ ClO ₂
分子量	244.673
纯度	≥ 96%

产品说明

3-chloro-5H-benzo[b][1]benzoxepin-6-one 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 3-chloro-5H-benzo[b][1]benzoxepin-6-one, CAS 号为 55595-54-5, 分子式为 C₁₄H₉ClO₂, 分子量为 244.673。该化合物是一种含氯苯并氧杂环衍生物, 纯度 ≥96%, 常温下为白色至类白色结晶粉末。其结构中融合了苯并氧杂环和酮基团, 赋予其独特的电子分布和化学反应活性, 在有机溶剂如甲醇、乙醇中具有中等溶解性, 不溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯并氧杂环类衍生物, 可通过干扰特定酶活性或受体结合发挥生物效应。其结构中的氯原子和酮基是关键药效团, 在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰。研究表明, 类似结构的分子在抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统调节方面具有潜在应用价值, 是药物研发领域的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 可作为构建复杂杂环化合物的关键砌块, 用于激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的合成。在材料科学中, 其刚性稠环结构可用于功能材料的分子设计。具体实验用途包括但不限于: 新药筛选的活性分子库构建、结构-活性关系 (SAR) 研究以及光敏材料的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需在干燥环境中尽快使用, 避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解时建议先用 DMSO 配制母液, 再稀释至工作浓度。注意该化合物对强氧化剂敏感, 需避免与还原性物质共存。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间质量稳定。MS 和 NMR 谱图可提供验证。安全数据表明, 该物质可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应遵循 GHS 分类: H315-

H319-H335。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。详细毒理学数据可参考材料安全数据表（MSDS）。

注：本产品仅限科研用途，不适用于医药、食品或家庭用途。使用者应具备专业化学品操作资质。