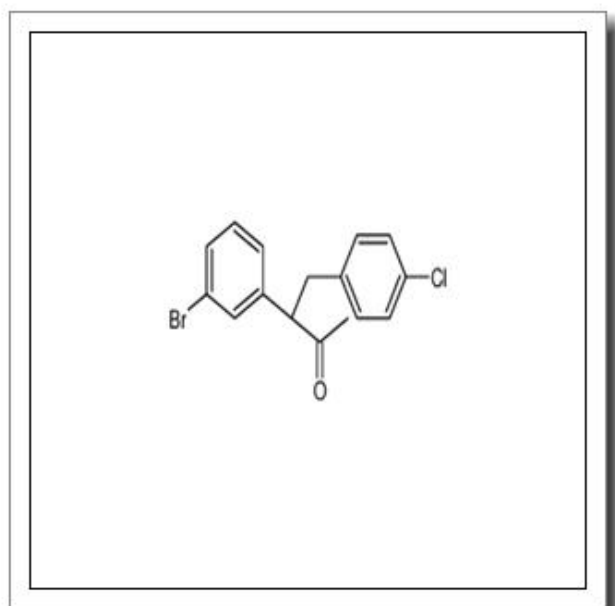


(3S)-3-(3-bromophenyl)-4-(4-chlorophenyl)butan-2-one

(3S)-3-(3-bromophenyl)-4-(4-chlorophenyl)butan-2-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3S)-3-(3-bromophenyl)-4-(4-chlorophenyl)butan-2-one
中文名称	(3S)-3-(3-bromophenyl)-4-(4-chlorophenyl)butan-2-one
CAS 号	1002752-54-6
分子式	C ₁₆ H ₁₄ BrClO
分子量	337.639
纯度	≥ 96%

产品说明

(3S)-3-(3-溴苯基)-4-(4-氯苯基)丁-2-酮产品说明书

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(3S)-3-(3-溴苯基)-4-(4-氯苯基)丁-2-酮，CAS 号为 1002752-54-6，分子式为 C₁₆H₁₄BrClO，分子量 337.639。其结构特征为含溴苯基与氯苯基的不对称酮类衍生物，具有明确的手性中心(3S 构型)。常温下呈白色至类白色结晶或粉末，脂溶性良好，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇等。产品纯度 ≥96%，通过 HPLC、NMR 等严格检测确认。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯基烷基酮类衍生物，其结构中的溴和氯取代基赋予其独特的电子效应与空间位阻，在药物化学中常作为关键中间体用于构建生物活性分子。其手性中心对靶标分子的立体选择性结合具有潜在调控作用，尤其在 GPCR 受体调节剂或酶抑制剂设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发与有机合成领域：

- (1) 抗精神病药物或抗炎药物先导化合物的结构修饰
- (2) 手性催化剂或配体的合成前体
- (3) 用于研究芳香族化合物亲电取代反应的模型底物
- (4) 作为荧光探针或标记物的核心骨架

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，开封后建议充氮保存。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，推荐使用玻璃或聚四氟乙烯材质容器。溶解时建议先以少量 DMSO 预溶，再稀释至目标溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱(MS)及元素分析(EA)验证结构，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据如下：

- (1) GHS 危害分类: 皮肤刺激 (Category 2)、眼刺激 (Category 2A)
- (2) 防护措施: 佩戴护目镜、防化手套及实验服, 避免吸入粉尘
- (3) 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗, 眼部接触需用生理盐水持续冲洗 15 分钟
- (4) 废弃物处置: 按危险有机卤化物规范处理

注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用需结合具体实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。