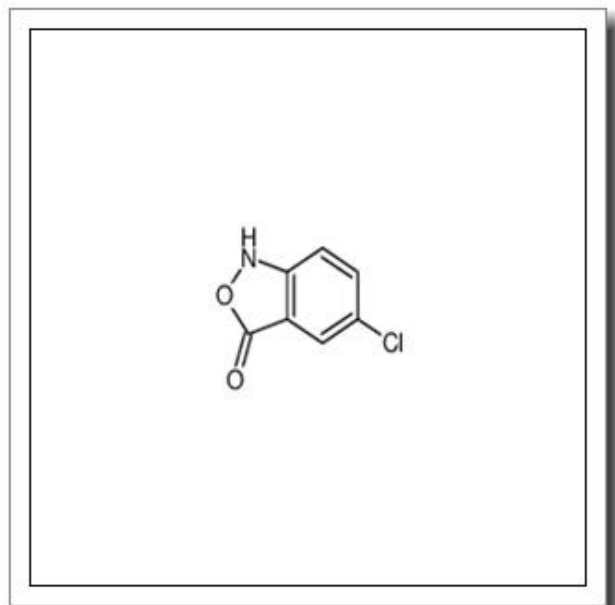


5-chloro-1H-2,1-benzoxazol-3-one

5-chloro-1H-2,1-benzoxazol-3-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-chloro-1H-2,1-benzoxazol-3-one
中文名称	5-chloro-1H-2,1-benzoxazol-3-one
CAS 号	344779-31-3
分子式	C ₇ H ₄ ClN ₂ O ₂
分子量	169.565
纯度	≥96%

产品说明

5-氯-1H-2,1-苯并恶唑-3-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-氯-1H-2,1-苯并恶唑-3-酮 (CAS 号: 344779-31-3) 是一种含氯杂环化合物, 分子式为 $C_7H_4ClN_2O_2$, 分子量为 169.565。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有苯并恶唑酮的核心结构, 氯原子的引入增强了其反应活性与生物活性。其化学稳定性良好, 但在强酸或强碱条件下可能发生开环反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并恶唑酮类衍生物, 该化合物可通过干扰酶活性或与生物大分子结合发挥作用。其结构中的氯原子和恶唑酮环使其成为药物化学中重要的中间体, 尤其在抗菌、抗肿瘤先导化合物的合成中具有潜在价值。此外, 它还可作为荧光探针或分子标记物的构建模块。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 常用于构建具有生物活性的杂环化合物库; 在材料科学中, 可作为功能化聚合物的单体或改性剂。具体应用包括但不限于: 抗感染药物中间体、激酶抑制剂前体、光电材料合成原料等。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 水溶性较低, 建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 为大鼠经口 >500 mg/kg, 属于刺激性物质。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 若接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。