

7-溴-2,3-二氢-异吲哚-1-酮

7-bromo-2,3-dihydroisoindol-1-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	7-bromo-2,3-dihydroisoindol-1-one
中文名称	7-溴-2,3-二氢-异吲哚-1-酮
CAS 号	200049-46-3
分子式	C ₈ H ₆ BrNO
分子量	212.043
纯度	>96%

产品说明

7-溴-2,3-二氢-异吲哚-1-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

7-溴-2,3-二氢-异吲哚-1-酮 (7-bromo-2,3-dihydroisoindol-1-one) 是一种含溴杂环化合物, 化学式为 C_8H_6BrNO , 分子量为 212.043, CAS 号为 200049-46-3。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度高于 96%, 具有典型的异吲哚酮骨架结构, 其溴取代基赋予其独特的反应活性。该物质易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为异吲哚酮类衍生物, 该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体, 尤其在药物化学领域具有重要价值。其结构中的溴原子可作为反应位点参与偶联反应或亲核取代反应, 常用于构建更复杂的杂环体系。此外, 异吲哚酮骨架本身与多种酶靶点 (如激酶或 G 蛋白偶联受体) 具有潜在相互作用, 使其在药物筛选中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 它是合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的重要前体。例如, 可用于构建 PARP 抑制剂或激酶抑制剂的母核结构。在材料科学中, 可作为功能化聚合物的单体或修饰剂。实验室中常将其用于探索新型杂环化合物的合成路径或构效关系研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液建议现配现用, 避免长时间储存导致降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 并提供质谱和核磁数据以确证结构。其急性毒性数据为 LD_{50} (大鼠口服) > 500 mg/kg, 属于刺激性化学品, 接触皮肤或眼睛可能引

起炎症。操作时应遵守化学品通用防护规范，废弃物需按有害化学废物处理。安全数据表（SDS）可随货提供或另行索取。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗等医疗行为。使用者应具备相关化学知识并遵守当地法规。