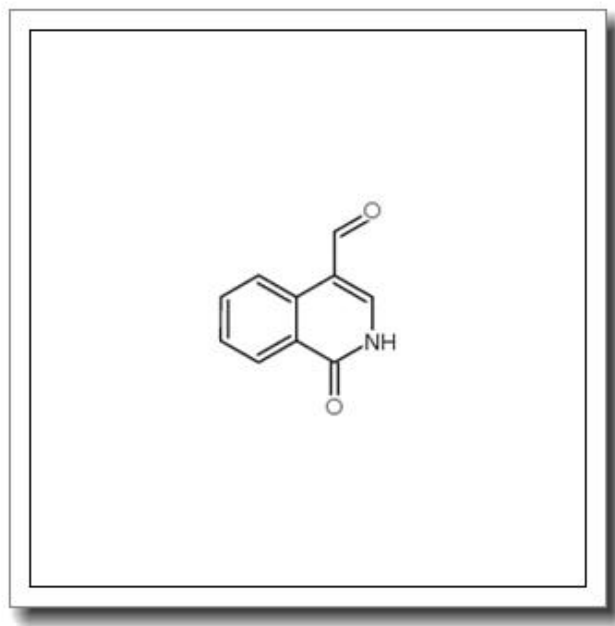


1-氧代-1,2-二氢异喹啉-4-甲醛

1-oxo-2H-isoquinoline-4-carbaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-oxo-2H-isoquinoline-4-carbaldehyde
中文名称	1-氧代-1,2-二氢异喹啉-4-甲醛
CAS 号	63125-40-6
分子式	C ₁₀ H ₇ N ₂ O
分子量	173.168
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-氧代-1,2-二氢异喹啉-4-甲醛 (1-oxo-2H-isoquinoline-4-carbaldehyde) 是一种杂环有机化合物, CAS 号为 63125-40-6, 分子式为 C₁₀H₇N₀O₂, 分子量为 173.168。该化合物以白色至淡黄色结晶或粉末形式存在, 纯度不低于 96%。其结构特征为异喹啉骨架的 1 位氧代和 4 位醛基修饰, 使其兼具芳香性和亲电性, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子的构建模块。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中具有潜在的应用价值。其异喹啉核心结构常见于多种天然产物和药物分子中, 例如抗菌、抗炎或抗肿瘤活性化合物。4 位醛基可作为反应位点, 与氨基或巯基等官能团发生缩合反应, 用于构建更复杂的杂环体系或药物前体。此外, 其结构可能参与酶抑制或信号通路调控研究, 但具体机制需进一步验证。

3. 主要应用领域与具体用途

1-氧代-1,2-二氢异喹啉-4-甲醛主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是合成异喹啉类衍生物的关键中间体, 可用于开发抗感染或抗肿瘤候选药物。在材料科学中, 其醛基可用于制备功能化聚合物或荧光探针。此外, 该化合物还可作为学术研究的工具分子, 用于探索杂环化合物的反应性和生物活性。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度控制在 2-8° C, 以延长稳定性。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 密封保存, 避免吸湿或氧化。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, 但在水中溶解度较低, 建议根据实验需求选择合适的溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度 ≥96%, 并提供批次相关的分析证书 (COA)。安全方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性, 操作时需

佩戴防护手套、护目镜和口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。

以上信息仅供参考，具体实验设计请结合文献和实际需求进行验证。