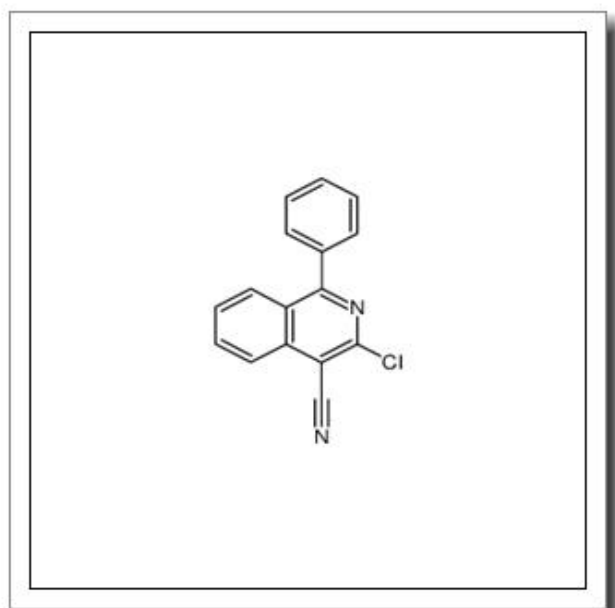


3-chloro-1-phenyl-isoquinoline-4-carbonitrile

3-chloro-1-phenyl-isoquinoline-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-chloro-1-phenyl-isoquinoline-4-carbonitrile
中文名称	3-chloro-1-phenyl-isoquinoline-4-carbonitrile
CAS 号	72118-85-5
分子式	C ₁₆ H ₉ ClN ₂
分子量	264.709
纯度	≥ 96%

产品说明

3-氯-1-苯基异喹啉-4-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氯-1-苯基异喹啉-4-甲腈（CAS 号：72118-85-5）是一种含氯杂环化合物，分子式为 C₁₆H₉ClN₂，分子量 264.709。该化合物以白色至淡黄色结晶粉末形式存在，纯度 ≥96%，具有典型的芳香杂环结构特征。其化学结构中包含氯原子、苯基和氰基官能团，赋予其独特的电子效应和反应活性，适合作为有机合成中间体或药物研发中的关键砌块。

2. 生物化学功能与重要性

作为异喹啉衍生物，该化合物在生物活性分子设计中具有重要价值。其结构中的氯原子和氰基可增强与生物靶标的相互作用，潜在应用于激酶抑制剂或抗菌剂的开发。异喹啉骨架本身是多种天然生物碱的核心结构，因此该衍生物在药物化学领域常被用于构效关系研究或先导化合物优化。

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。在药物化学中，可作为构建抗肿瘤或抗感染化合物的中间体；在材料科学中，可用于合成荧光染料或光电材料的前体。

具体用途包括但不限于：

- 激酶抑制剂类药物的结构修饰
- 金属催化偶联反应的底物
- 杂环化合物库的高通量筛选

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光环境下密封保存，长期储存温度应低于-20℃。开封后需充惰性气体保护，避免吸湿和氧化。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）、二氯甲烷等有机溶剂，水溶性较差，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

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间质量稳定。安全数据表明其属于刺激性化学品，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。如意外接触眼睛，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例，建议通过专业机构进行无害化处置。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实际需求进行验证。）