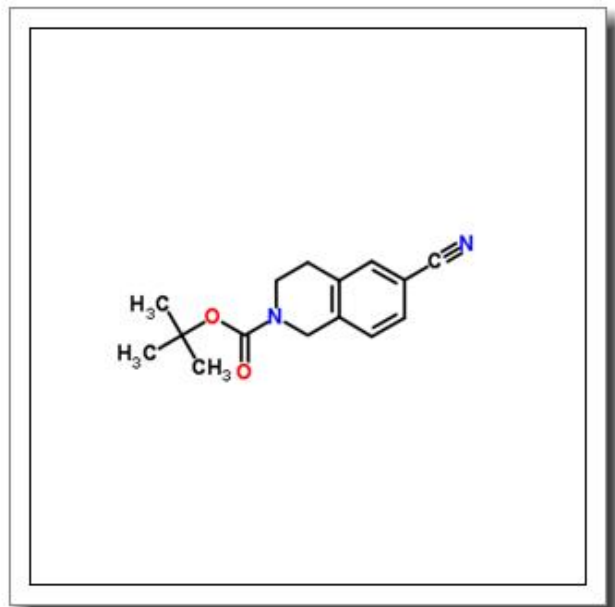


6-氰基-3,4-二氢-2(1H)-异喹啉羧酸-1,1-二甲基乙酯

tert-butyl 6-cyano-3,4-dihydro-1H-isoquinoline-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 6-cyano-3,4-dihydro-1H-isoquinoline-2-carboxylate
中文名称	6-氰基-3,4-二氢-2(1H)-异喹啉羧酸-1,1-二甲基乙酯
CAS 号	166398-33-0
分子式	C ₁₅ H ₁₈ N ₂ O ₂
分子量	258.316
纯度	≥96%

产品说明

产品名称: 6-氰基-3,4-二氢-2(1H)-异喹啉羧酸-1,1-二甲基乙酯

英文名称: tert-butyl 6-cyano-3,4-dihydro-1H-isoquinoline-2-carboxylate

CAS 号: 166398-33-0

分子式: C₁₅H₁₈N₂O₂

分子量: 258.316

纯度: ≥96%

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末, 化学结构中包含氰基和异喹啉骨架, 是一种重要的有机中间体。其分子式为 C₁₅H₁₈N₂O₂, 分子量为 258.316, CAS 号为 166398-33-0。该化合物在常温下稳定, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

6-氰基-3,4-二氢-2(1H)-异喹啉羧酸-1,1-二甲基乙酯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。其异喹啉骨架和氰基官能团为后续衍生化反应提供了多样化的修饰位点, 常用于构建具有药理活性的杂环化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的重要中间体。
- 用于构建异喹啉类衍生物, 研究其结构与活性的关系。
- 在催化反应或光化学反应中作为底物或配体使用。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 建议密封保存于 2-8℃ 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。
- 使用建议: 操作时需佩戴防护手套、护目镜和实验服, 确保通风良好。避免吸入粉尘或直接接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：本品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供详细的质检报告（COA）。
- 安全信息：该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性，使用时需严格遵守实验室安全规范。如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家法规处理。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验需求和安全评估。