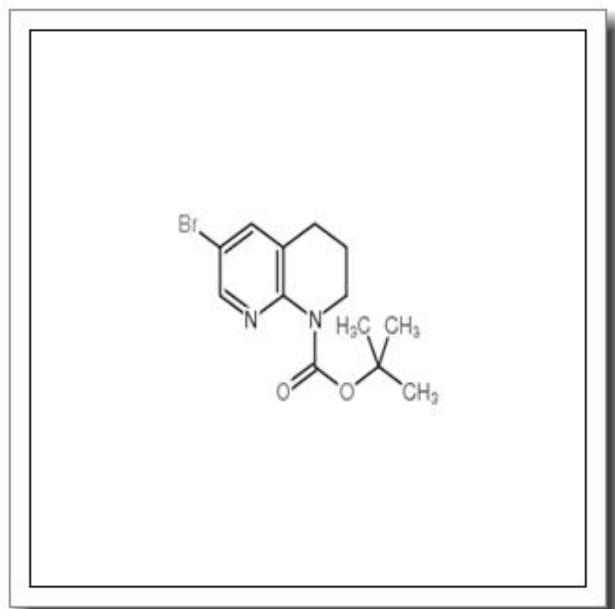


6-溴-3,4-二氢-1,8-萘啶-1(2H)-羧酸叔丁酯

tert-butyl 6-bromo-3,4-dihydro-2H-1,8-naphthyridine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 6-bromo-3,4-dihydro-2H-1,8-naphthyridine-1-carboxylate
中文名称	6-溴-3,4-二氢-1,8-萘啶-1(2H)-羧酸叔丁酯
CAS 号	335030-38-1
分子式	C ₁₃ H ₁₇ BrN ₂ O ₂
分子量	313.19
纯度	≥96%

产品说明

6-溴-3,4-二氢-1,8-萘啶-1(2H)-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 6-bromo-3,4-dihydro-2H-1,8-naphthyridine-1-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 335030-38-1, 分子式为 C₁₃H₁₇BrN₂O₂, 分子量为 313.19。该化合物为白色至类白色固体, 纯度 ≥96%, 具有稳定的化学性质, 其结构中的溴原子和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团使其在有机合成中具有较高的反应活性。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于萘啶类衍生物, 其分子结构包含一个溴取代基和一个 Boc 保护基团。溴原子的存在使其易于参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 偶联等), 而 Boc 基团可在酸性条件下脱保护, 释放出游离的氨基, 进一步用于构建复杂分子。其熔点和溶解度数据需参考具体实验条件, 建议在干燥惰性气体环境下操作以避免吸湿或降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为医药中间体, 该化合物在药物研发中具有重要价值, 尤其用于合成含氮杂环类活性分子。萘啶骨架常见于抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物中, 其溴代衍生物可通过进一步官能团化引入多样结构, 为候选药物库的构建提供关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

主要用于医药和农药领域:

- 医药研发: 作为激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂等靶向药物的合成前体。
- 农药化学: 用于构建具有杀虫或杀菌活性的杂环化合物。
- 材料科学: 可作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。使用时需在干燥环境中操作, 避免与强酸、强氧化剂接触。溶解性测试推荐使用二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 溶液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ 。使用者需佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中操作。其安全数据表（SDS）显示，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，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，禁止直接排放。

以上信息仅供参考，具体实验条件请结合文献及实际需求优化。