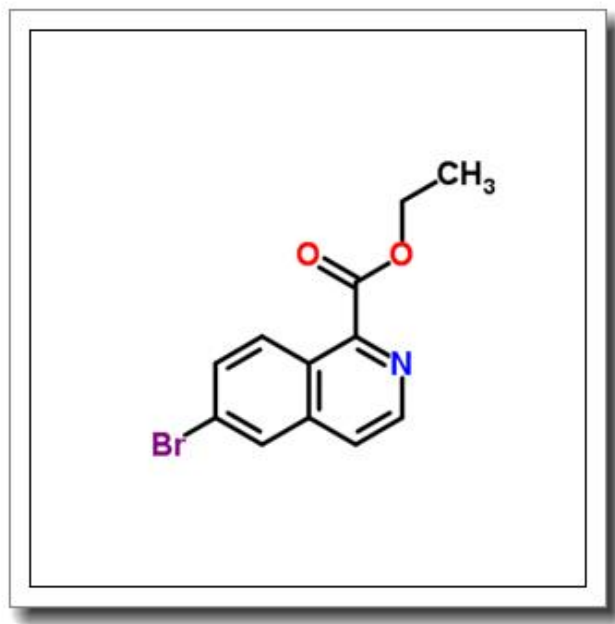


6-溴异喹啉-1-甲酸乙酯

ethyl 6-bromo-1-isoquinolinecarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 6-bromo-1-isoquinolinecarboxylate
中文名称	6-溴异喹啉-1-甲酸乙酯
CAS 号	1020576-70-8
分子式	C ₁₂ H ₁₀ BrN ₂ O ₂
分子量	280.117
纯度	≥96%

产品说明

6-溴异喹啉-1-甲酸乙酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

6-溴异喹啉-1-甲酸乙酯 (ethyl 6-bromo-1-isoquinolinecarboxylate) 是一种有机溴化物, 化学式为 $C_{12}H_{10}BrNO_2$, 分子量为 280.117, CAS 号为 1020576-70-8。该化合物为白色至浅黄色结晶或粉末, 纯度不低于 96%。其结构中含有异喹啉骨架和溴取代基, 具有较高的反应活性, 常用于有机合成和药物研发中作为关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

6-溴异喹啉-1-甲酸乙酯在生物化学领域具有重要价值。其异喹啉结构是许多生物活性分子的核心骨架, 如抗菌、抗肿瘤和神经调节药物。溴原子的引入进一步增强了其作为亲电试剂的反应性, 使其在偶联反应和官能团转化中表现出色。该化合物在药物分子设计和先导化合物优化中常作为重要砌块使用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中, 它是构建异喹啉类药物的关键中间体, 可用于开发抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物。在材料科学中, 可用于合成荧光探针或配体分子。此外, 它还作为有机合成中的溴化试剂, 参与 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥、避光环境中密封保存, 避免与强氧化剂或强酸接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 微溶于水。建议使用前通过 TLC 或 HPLC 确认纯度, 必要时进行重结晶纯化。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (质量分析证书)。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应避免直接接触。如

不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品处理规范处置。运输时需符合 UN 编号和危险品分类要求。

以上信息仅供参考，具体实验条件需根据实际需求优化。