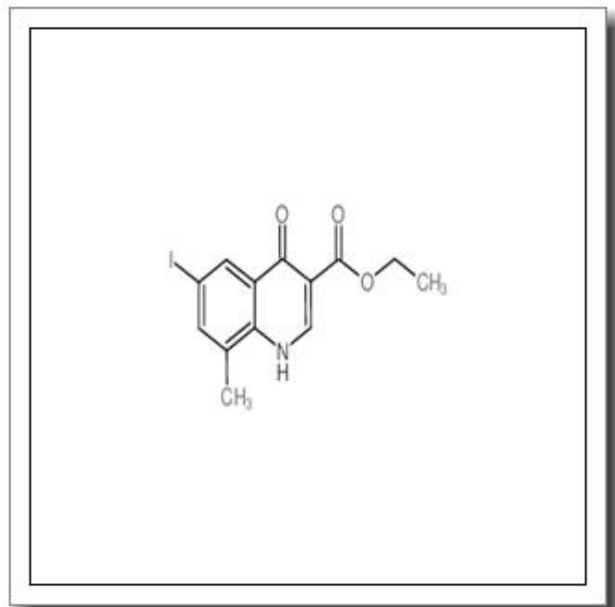


6-碘-8-甲基-4-氧代-1,4-二氢喹啉-3-羧酸乙酯

ethyl 6-iodo-8-methyl-4-oxo-1H-quinoline-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 6-iodo-8-methyl-4-oxo-1H-quinoline-3-carboxylate
中文名称	6-碘-8-甲基-4-氧代-1,4-二氢喹啉-3-羧酸乙酯
CAS 号	951006-39-6
分子式	C ₁₃ H ₁₂ IN ₃ O ₃
分子量	357.144
纯度	≥96%

产品说明

6-碘-8-甲基-4-氧代-1,4-二氢喹啉-3-羧酸乙酯 (Ethyl 6-iodo-8-methyl-4-oxo-1H-quinoline-3-carboxylate) 是一种重要的喹啉类衍生物, CAS 号为 951006-39-6, 分子式为 $C_{13}H_{12}IN_2O_3$, 分子量为 357.144。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有特定的碘代和酯基官能团, 在有机合成和药物化学中具有广泛的应用价值。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于喹啉羧酸酯类, 其结构中的碘原子和酯基使其具有较高的反应活性。碘代喹啉骨架在交叉偶联反应中可作为关键中间体, 而 4-氧代-1,4-二氢喹啉核心结构则赋予其潜在的生物活性。其熔点和溶解度数据需参考具体实验条件, 建议在干燥避光环境下保存以维持稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为喹啉类化合物的衍生物, 该产品可能表现出抗菌、抗炎或抗肿瘤活性, 具体需通过进一步药理实验验证。其结构中的碘原子可参与金属催化反应 (如 Suzuki 偶联), 是构建复杂药物分子的重要砌块。此外, 酯基的存在使其易于水解为羧酸, 进一步拓展了其在药物修饰中的应用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发领域, 可作为抗感染药物或激酶抑制剂的合成前体。在材料科学中, 可用于制备荧光标记物或光电材料。实验室中常用于研究喹啉类化合物的结构-活性关系, 以及开发新型催化反应体系。

4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于 $2-8^{\circ}C$ 避光环境中, 长期保存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试推荐先尝试 DMSO 或二氯甲烷等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间稳定性良好。MS 和 NMR 数据可提供验

证。安全方面，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合文献和实际需求设计。