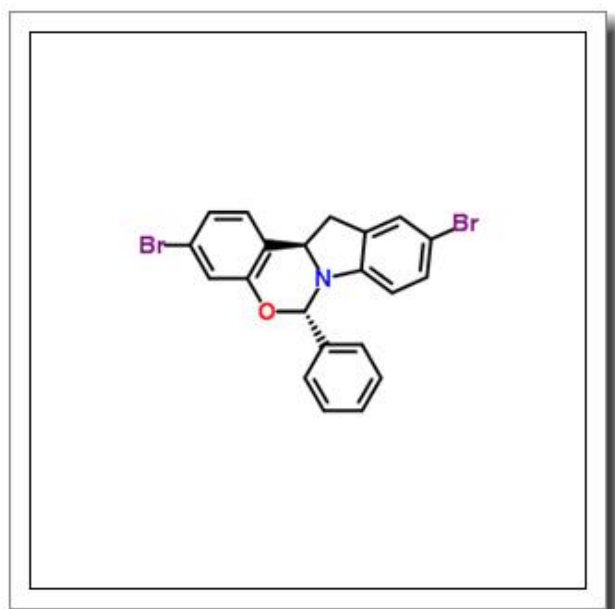


(6S,12aR)-3,10-二溴-6-苯基 12,12a-二氢-6H-苯并[5,6][1,3]恶嗪并[3,4- α]吲哚

(6S, 12aR)-3, 10-dibromo-6-phenyl-12, 12a-dihydro-6H-benzo[5, 6][1, 3]oxazino[3, 4-a]indole



产品基本信息

属性	值
化学名称	(6S, 12aR)-3, 10-dibromo-6-phenyl-12, 12a-dihydro-6H-benzo[5, 6][1, 3]oxazino[3, 4-a]indole
中文名称	(6S, 12aR)-3, 10-二溴-6-苯基 12, 12a-二氢-6H-苯并[5, 6][1, 3]恶嗪并[3, 4- α]吲哚
CAS 号	1585969-16-9
分子式	C ₂₁ H ₁₅ Br ₂ N ₂ O
分子量	457. 158
纯度	≥96%

产品说明

(6S, 12aR) -3, 10-二溴-6-苯基 12, 12a-二氢-6H-苯并[5, 6][1, 3]恶嗪并[3, 4- α]吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机溴化物，化学名称 (6S, 12aR) -3, 10-二溴-6-苯基 12, 12a-二氢-6H-苯并[5, 6][1, 3]恶嗪并[3, 4- α]吡啶，CAS 号 1585969-16-9，分子式 C₂₁H₁₅Br₂N₂O，分子量 457.158。其结构融合恶嗪环与吡啶骨架，含两个溴原子及手性中心 (6S, 12aR 构型)，赋予其独特空间位阻和电子效应。常温下为白色至淡黄色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多环杂芳烃衍生物，具有显著的生物活性潜力。溴原子的引入增强了其亲电性，可作为关键中间体参与偶联反应或酶抑制研究。手性结构使其在不对称合成和药物靶点识别中具有价值，尤其适用于探索神经递质受体或蛋白激酶的调控机制。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于构建抗癌或抗炎先导化合物，特别是针对 BRD4 等表观遗传靶点的小分子抑制剂开发。
- 3.2 材料科学：作为有机发光二极管 (OLED) 的潜在掺杂材料，利用其刚性共轭体系调节光电性能。
- 3.3 化学合成：充当多组分反应的砌块，或通过钯催化交叉偶联反应进一步官能团化。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封保存于 -20°C 惰性气体 (如氩气) 环境中，避免反复冻融。
- 4.2 溶解性：推荐使用二甲基亚砜 (DMSO) 或二氯甲烷溶解，工作浓度需通过预实验优化。
- 4.3 防护：操作时需佩戴防毒面具及丁腈手套，在通风橱中进行称量。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质控：通过 HPLC 测定纯度，批次间误差 \leq 1%；核磁共振（ $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ NMR）及质谱（HRMS）验证结构。

5.2 安全：根据 GHS 分类，该产品可能导致皮肤刺激（H315）和眼损伤（H319），应急处理需用大量清水冲洗接触部位。

5.3 运输：符合 UN2811 标准，按危险化学品等级包装，附材料安全数据表（MSDS）。

注：本产品仅限科研用途，禁止用于人体或食品相关领域。使用前请查阅最新文献并评估实验风险。