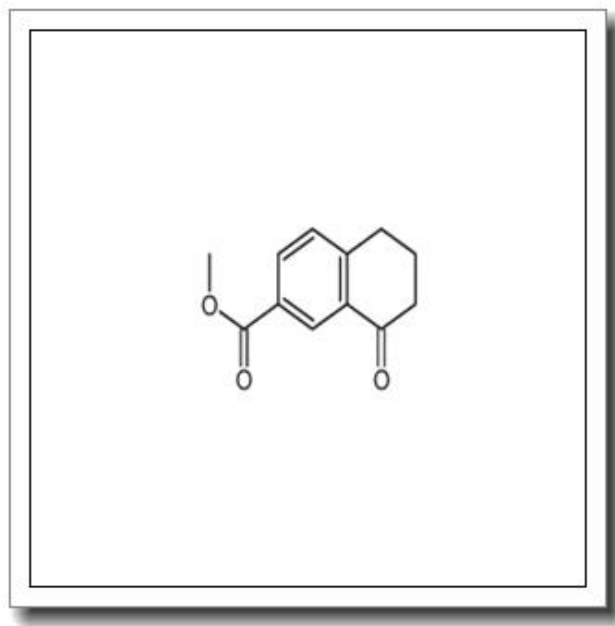


8-氧代-5,6,7,8-四氢萘-2-羧酸甲酯

methyl 8-oxo-6,7-dihydro-5H-naphthalene-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 8-oxo-6,7-dihydro-5H-naphthalene-2-carboxylate
中文名称	8-氧代-5,6,7,8-四氢萘-2-羧酸甲酯
CAS 号	116047-26-8
分子式	C ₁₂ H ₁₂ O ₃
分子量	204.222
纯度	≥96%

产品说明

8-氧代-5,6,7,8-四氢萘-2-羧酸甲酯 (Methyl 8-oxo-6,7-dihydro-5H-naphthalene-2-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 116047-26-8, 分子式为 C₁₂H₁₂O₃, 分子量为 204.222。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 ≥96%, 具有萘环骨架结构, 其 8 位氧代基团和 2 位羧酸甲酯官能团赋予其独特的化学反应性。该产品易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 但在水中溶解度较低, 需避光保存以防光解。

在生物化学领域, 该化合物作为萘衍生物, 是合成多种生物活性分子的关键砌块。其结构中的羰基和酯基可参与缩合、还原、亲核加成等反应, 常用于构建复杂杂环体系。在药物研发中, 此类结构常作为激酶抑制剂或抗炎药物的核心骨架, 尤其在抗肿瘤和神经退行性疾病相关靶点研究中具有潜在价值。

该产品主要应用于医药中间体合成和材料科学领域。具体用途包括: 1. 作为抗肿瘤药物 (如拓扑异构酶抑制剂) 的前体; 2. 用于合成光电材料中的萘系共轭单元; 3. 在有机催化反应中作为手性配体的合成原料。实验室使用时建议在惰性气体保护下进行敏感反应, 工业规模生产需严格控制反应温度和 pH 值。

储存条件要求严格: 需置于密闭容器中, -20° C 冷冻保存, 长期储存建议充入氮气保护。开封后应在干燥环境中尽快使用, 避免反复冻融。操作时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中进行, 防止吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。

质量控制通过 HPLC 测定纯度, 批次间差异控制在 ±0.5% 以内, 同时检测重金属残留 (≤10ppm) 和水分含量 (≤0.5%)。安全数据表明该物质对水生生物有毒, 需按危险化学品管理, 废弃物处理应遵守当地环保法规。运输时分类为 9 类杂项危险品, 需提供完整的 MSDS 文件。