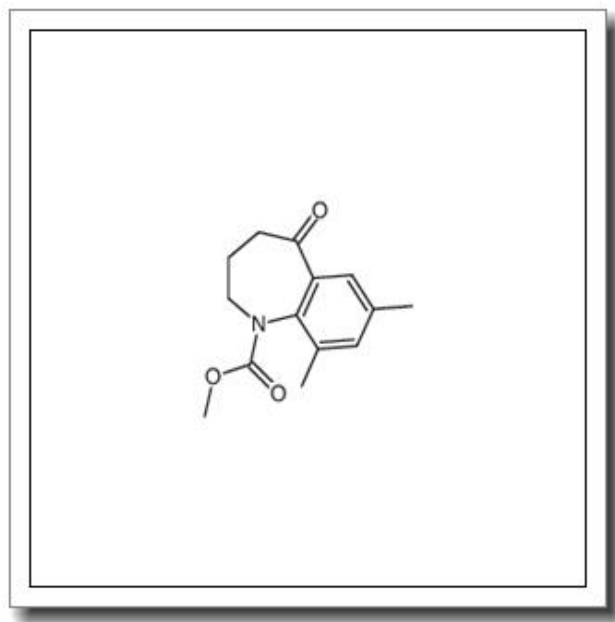


methyl 7,9-dimethyl-5-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b]azepine-1-carboxylate

methyl 7,9-dimethyl-5-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b]azepine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 7,9-dimethyl-5-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b]azepine-1-carboxylate
中文名称	methyl 7,9-dimethyl-5-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b]azepine-1-carboxylate
CAS 号	1259393-27-5
分子式	C ₁₄ H ₁₇ N ₃ O ₃
分子量	247.29
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为甲基 7,9-二甲基-5-氧代-2,3,4,5-四氢-1H-苯并[b]氮杂萘-1-羧酸酯 (methyl 7,9-dimethyl-5-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1H-benzo[b]azepine-1-carboxylate), CAS 号为 1259393-27-5, 分子式为 C₁₄H₁₇N₃O₃, 分子量为 247.29。该化合物是一种含氮杂环衍生物, 结构中包含苯并氮杂萘骨架和羧酸酯基团, 具有较高的化学稳定性和特异性反应活性。其纯度 ≥96%, 符合生化试剂标准, 适用于精细有机合成及药物研发领域。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯并氮杂萘类衍生物, 可通过其活性羰基和酯基参与多种亲核反应或环化反应, 在构建复杂杂环结构中具有重要作用。其分子中的氮杂萘核心结构常见于生物活性分子中, 可能作为药物中间体用于开发神经调节剂或酶抑制剂。此外, 其结构修饰潜力使其在探针分子设计和靶向递送系统中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 可作为合成抗焦虑或抗抑郁类药物的重要中间体; 在材料科学中, 可用于制备功能性高分子单体。具体用途包括但不限于: 作为手性合成砌块、参与多组分反应构建杂环库、或作为荧光标记物的前体。实验表明, 其衍生物可能对特定受体表现出选择性结合能力。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应密封干燥存放于干燥器中, 避免与湿气或强氧化剂接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解性测试显示易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性较差, 建议先用极性有机溶剂预溶后再进行后续反应。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数据

表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并按规定处置废弃物。毒理学数据尚未完全明确，建议按照潜在有害化学品规范管理。运输分类为非危险品，但需提供化学品安全技术说明书（MSDS）备案。

注：以上信息基于现有实验数据，具体应用需结合进一步研究验证。建议使用者根据实际需求开展小试实验以确定最佳反应条件。