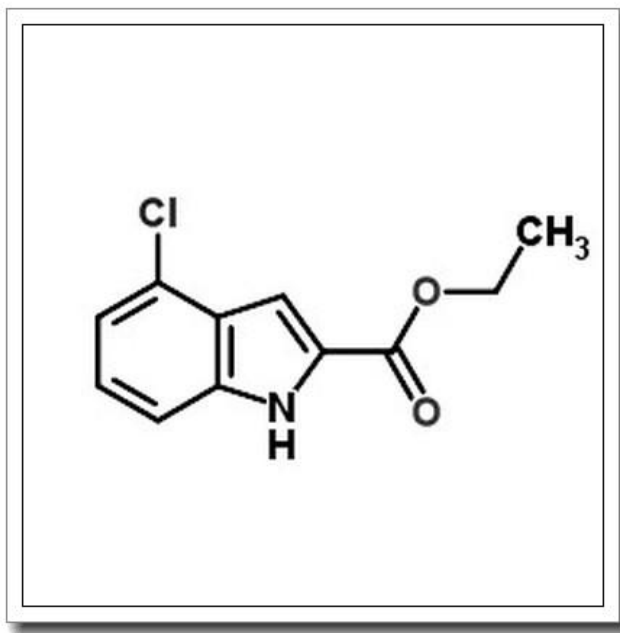


4-氯-1H-吲哚-2-甲酸乙酯

ethyl 4-chloro-1H-indole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-chloro-1H-indole-2-carboxylate
中文名称	4-氯-1H-吲哚-2-甲酸乙酯
CAS 号	53590-46-8
分子式	C ₁₁ H ₁₀ ClN ₂ O ₂
分子量	223.656
纯度	>96%

产品说明

4-氯-1H-吲哚-2-甲酸乙酯 (Ethyl 4-chloro-1H-indole-2-carboxylate) 是一种重要的吲哚类衍生物, CAS 号为 53590-46-8, 分子式为 $C_{11}H_{10}ClN_2O_2$, 分子量为 223.656。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于多种有机溶剂如乙醇、二甲基亚砷 (DMSO) 和氯仿。其结构中的氯取代基和酯基使其成为有机合成和药物化学中的关键中间体。

1. 产品概述与化学特性

4-氯-1H-吲哚-2-甲酸乙酯是一种含氯吲哚衍生物, 其分子结构包含吲哚环、氯取代基和羧酸乙酯基团。这种结构赋予其独特的反应活性, 使其易于参与亲核取代、还原和偶联等反应。其熔点和沸点数据需参考具体实验条件, 建议在使用前通过核磁共振 (NMR) 或高效液相色谱 (HPLC) 进一步确认纯度。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中常用于构建更复杂的吲哚类化合物, 尤其是具有生物活性的分子。吲哚骨架广泛存在于天然产物和药物分子中, 如抗炎、抗肿瘤和抗菌药物。4-氯取代的吲哚衍生物因其电子效应和空间位阻, 常被用于优化药物分子的活性和选择性。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 作为中间体用于合成具有潜在药理活性的化合物, 如 5-羟色胺受体调节剂或激酶抑制剂。
- 有机合成: 用于构建含吲哚环的杂环化合物, 或通过进一步修饰开发新型材料。
- 农业化学: 可能作为合成农药或植物生长调节剂的前体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥、避光环境中储存, 长期保存需置于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用时应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解时建议使用惰性溶剂, 并在通风良好的条件下操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 \geq 96%。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性，操作时需遵循实验室安全规范。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，避免环境污染。

以上信息仅供参考，具体实验条件请结合文献和实际需求调整。