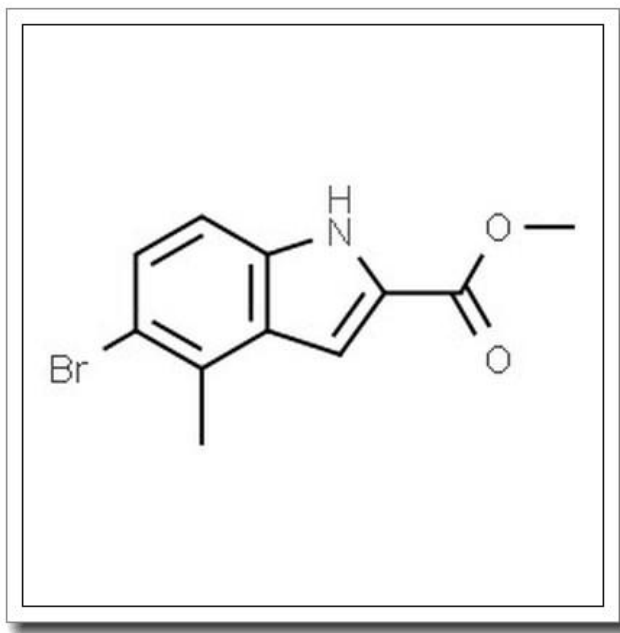


# 5-溴-4-甲基-1H-吲哚-2-羧酸甲酯

*methyl 5-bromo-4-methyl-1H-indole-2-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 5-bromo-4-methyl-1H-indole-2-carboxylate
中文名称	5-溴-4-甲基-1H-吲哚-2-羧酸甲酯
CAS 号	1857296-39-9
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> BrNO <sub>2</sub>
分子量	268.11
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-溴-4-甲基-1H-吲哚-2-羧酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-溴-4-甲基-1H-吲哚-2-羧酸甲酯 (Methyl 5-bromo-4-methyl-1H-indole-2-carboxylate) 是一种重要的吲哚类衍生物，化学式为  $C_{11}H_{10}BrNO_2$ ，分子量 268.11，CAS 号为 1857296-39-9。该化合物为白色至浅黄色结晶性粉末，纯度  $\geq 96\%$ ，具有典型的吲哚环结构和溴代甲基修饰位点，其酯化羧基增强了分子极性，使其在有机溶剂中具有良好的溶解性（如甲醇、二甲基亚砷）。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚骨架的溴代衍生物，该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。溴原子的引入显著提高了其反应活性，可通过偶联反应（如 Suzuki 反应）进一步功能化。4-甲基的位阻效应使其在药物化学中具有独特的立体选择性，常用于靶向 5-HT 受体或激酶抑制剂的研发。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中，用于合成抗肿瘤、抗抑郁及抗炎先导化合物；在材料科学中，可作为荧光探针或光电材料的构建单元。

具体实验用途包括：

- 作为吲哚类生物碱全合成的关键中间体
- 用于构建多环杂芳烃结构
- 在高通量筛选中作为分子骨架进行结构修饰

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}\text{C}$  干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，推荐溶解于无水 DMSO（浓度  $\leq 10\text{ mM}$ ）后分装冻存，避免反复冻融。工作浓度应根据具体实验体系优化，建议先进行小剂量测试。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ , MS 和  $^1\text{H}$  NMR 验证结构。安全数据:

- 危险代码: H315-H319-H335 (可能造成皮肤刺激、眼刺激和呼吸道刺激)
- 防护措施: 佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套
- 应急处理: 接触皮肤时立即用大量清水冲洗, 若吸入需转移至空气新鲜处
- 废弃物处置: 按危险化学品规范处理, 不可直接排入下水道

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案请参考文献或咨询专业技术支持。