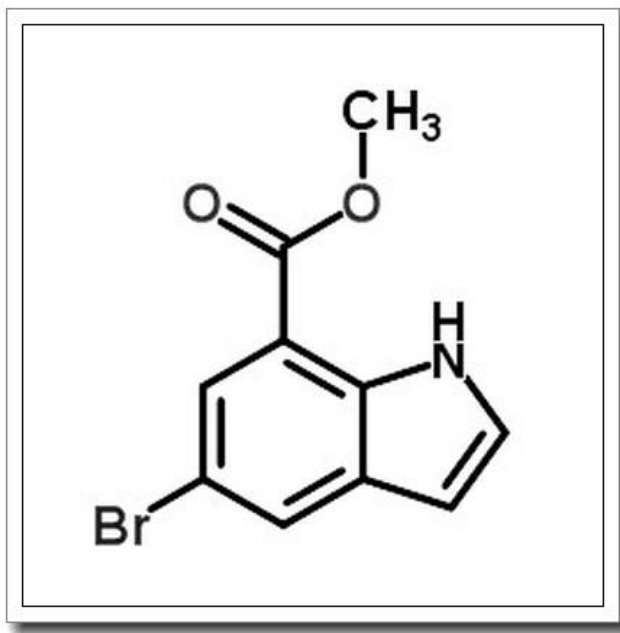


# 5-溴吲哚-7-甲酸甲酯

*Methyl 5-bromoindole-7-carboxylate*



## 产品基本信息

| 属性    | 值  |
|-------|--|
| 化学名称  | Methyl 5-bromoindole-7-carboxylate               |
| 中文名称  | 5-溴吲哚-7-甲酸甲酯                                     |
| CAS 号 | 860624-89-1                                      |
| 分子式   | C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> BrNO <sub>2</sub> |
| 分子量   | 254.08   |
| 纯度    | >96%   |

## 产品说明

### 5-溴吲哚-7-甲酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-溴吲哚-7-甲酸甲酯 (Methyl 5-bromoindole-7-carboxylate) 是一种重要的吲哚类衍生物，化学式为  $C_{10}H_8BrNO_2$ ，分子量 254.08，CAS 号为 860624-89-1。本品为白色至浅黄色结晶或粉末，纯度 >96%，具有吲哚环的典型芳香性及溴取代基的高反应活性。其结构中包含酯基和溴原子，使其成为有机合成中多功能的中间体，尤其适用于亲核取代和交叉偶联反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类化合物的修饰产物，5-溴吲哚-7-甲酸甲酯在生物碱合成和药物化学中具有关键作用。吲哚骨架广泛存在于天然产物（如色氨酸、血清素）和药物分子中，而溴原子的引入可显著增强其与生物靶点的相互作用。该化合物常用于构建具有抗菌、抗肿瘤或神经调节活性的复杂分子，是药物先导化合物优化的重要工具。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为合成抗肿瘤剂（如拓扑异构酶抑制剂）或抗炎药物的中间体。
- (2) 材料科学：用于制备荧光染料或光电功能材料的核心结构。
- (3) 农药化学：参与构建具有杀虫或杀菌活性的杂环化合物。

具体用途包括 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等过渡金属催化反应，以及作为吲哚-7-甲酸衍生物的前体。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8°C，长期保存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并避免直接暴露于空气中。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷，微溶于甲醇，不溶于水。实验操作应在通风橱中进行，并佩戴防护手套及护目镜。

## 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 为  $>500$  mg/kg (大鼠，口服)，但可能对眼睛和皮肤产生刺激性。废弃物处理需遵循当地法规，禁止直接排入下水道。如发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。提供 MSDS 及 COA 文件备案。

——本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗——