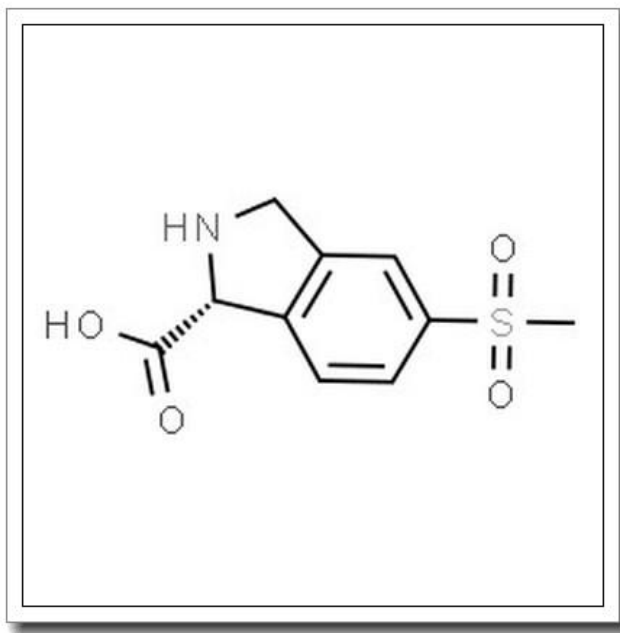


# (R)-5-(甲基磺酰基)异吲哚啉-1-羧酸

*(R)-5-(methylsulfonyl)isoindoline-1-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-5-(methylsulfonyl)isoindoline-1-carboxylic acid
中文名称	(R)-5-(甲基磺酰基)异吲哚啉-1-羧酸
CAS 号	1389390-05-9
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>04</sub> S
分子量	241.26
纯度	>96%

## 产品说明

### (R)-5-(甲基磺酰基)异吲哚啉-1-羧酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

(R)-5-(甲基磺酰基)异吲哚啉-1-羧酸 (CAS 号: 1389390-05-9) 是一种高纯度手性化合物, 分子式为  $C_{10}H_{11}NO_4S$ , 分子量 241.26。其结构特征为异吲哚啉骨架的 1 位羧酸取代与 5 位甲基磺酰基取代, 且具有 (R)-构型。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水。其磺酰基与羧酸官能团赋予分子强极性和反应活性, 适合作为手性合成砌块或药物中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为手性磺酰化异吲哚啉衍生物, 该化合物在不对称合成中具有显著价值。其 (R)-构型可定向诱导手性中心的形成, 常用于构建生物活性分子的立体选择性骨架。甲基磺酰基可作为氢键受体参与分子识别, 而羧酸基团便于进一步衍生化 (如酰胺化、酯化)。在药物化学中, 此类结构常见于蛋白酶抑制剂、GPCR 配体的设计, 尤其在神经系统疾病靶点研究中具有潜在应用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为手性中间体用于合成靶向药物, 如神经退行性疾病治疗候选分子。
- 3.2 不对称催化: 作为配体前体修饰过渡金属催化剂, 提高立体选择性反应效率。
- 3.3 生化探针: 通过磺酰基与靶蛋白结合, 用于酶活性位点结构研究。
- 3.4 材料科学: 参与构建手性功能材料, 如液晶分子或 MOFs 的有机连接体。

#### 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  $-20^{\circ}C$  长期保存, 室温下短期稳定。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气) 中操作, 避免与强氧化剂、强碱接触。溶解推

荐使用无水 DMSO (浓度 $\leq 10$  mM)，现配现用。实验操作需佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中进行。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $>96\%$ ，批次间一致性通过  $^1\text{H}$  NMR 和质谱确认。安全数据如下：

- 5.1 危险性：可能引起眼睛和皮肤刺激，吸入或误食有害。
- 5.2 应急处理：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗，眼睛接触需用生理盐水冲洗 15 分钟并就医。
- 5.3 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排入环境。

注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。