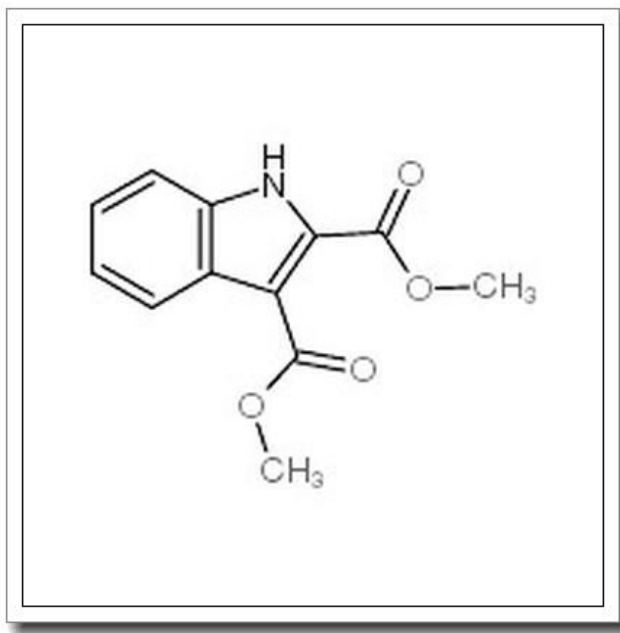


吲哚-2,3-二羧酸二甲酯

Dimethyl 1H-indole-2,3-dicarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Dimethyl 1H-indole-2,3-dicarboxylate
中文名称	吲哚-2,3-二羧酸二甲酯
CAS 号	54781-93-0
分子式	C ₁₂ H ₁₁ N ₀₄
分子量	233.22
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

吲哚-2,3-二羧酸二甲酯 (Dimethyl 1H-indole-2,3-dicarboxylate) 是一种重要的吲哚衍生物, 化学式为 $C_{12}H_{11}NO_4$, 分子量为 233.22。其 CAS 号为 54781-93-0, 纯度通常高于 96%。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 具有典型的酯类溶解性, 可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和乙酸乙酯, 但在水中溶解度较低。其结构中的吲哚环和双酯基团使其在有机合成和药物化学中具有独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

吲哚-2,3-二羧酸二甲酯是合成多种生物活性分子的关键中间体。吲哚骨架广泛存在于天然产物和药物分子中, 例如色氨酸衍生物和植物激素。该化合物的双酯基团可通过水解、还原或氨解等反应进一步修饰, 为构建复杂杂环化合物 (如吲哚啉酮类或喹啉类衍生物) 提供重要原料。其在药物研发中常用于构建抗炎、抗肿瘤或神经活性分子的核心结构。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药中间体的合成。在医药领域, 它是制备非甾体抗炎药和 5-羟色胺受体调节剂的起始原料。在农药化学中, 可用于开发具有杀虫或杀菌活性的吲哚类化合物。此外, 在材料科学中, 其衍生物可作为荧光探针或光电材料的构建单元。实验室中常用于研究吲哚环的官能团化反应机理。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融或暴露于潮湿环境。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议优先选用无水有机溶剂, 若需水相反应, 可先溶于少量 DMSO 再稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 杂质主要包括微量单酯水解产物。使用时应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 若不慎接触眼睛或皮肤, 立即用大量清水冲洗并就

医。其 LD50 数据尚未完全明确，但类似吡啶酯类化合物通常具有低至中等毒性。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。

（注：实际产品说明需根据具体检测报告和法规要求补充完整毒理学数据及 MSDS 信息。）