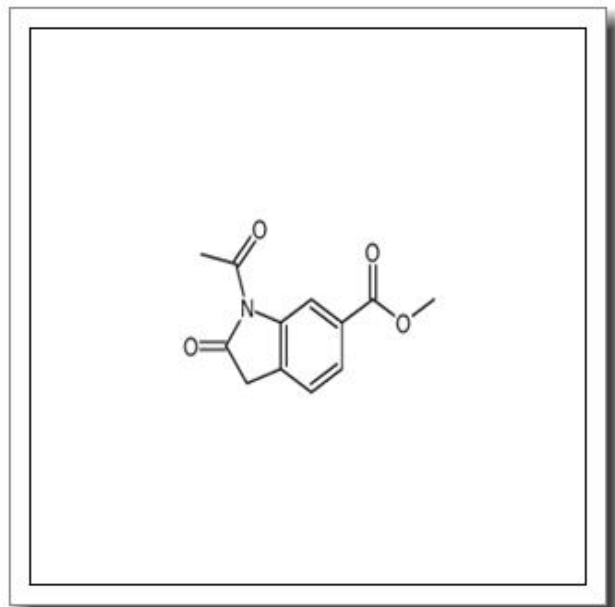


1-乙酰基-2,3-二氢-2-氧代-1H-吲哚-6-羧酸甲酯

methyl 1-acetyl-2-oxo-3H-indole-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 1-acetyl-2-oxo-3H-indole-6-carboxylate
中文名称	1-乙酰基-2,3-二氢-2-氧代-1H-吲哚-6-羧酸甲酯
CAS 号	676326-36-6
分子式	C ₁₂ H ₁₁ N ₁ O ₄
分子量	233.22
纯度	≥96%

产品说明

1-乙酰基-2,3-二氢-2-氧代-1H-吲哚-6-羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 methyl 1-acetyl-2-oxo-3H-indole-6-carboxylate，是一种含吲哚骨架的杂环化合物，CAS 号为 676326-36-6。其分子式为 C₁₂H₁₁N₀₄，分子量 233.22，常温下为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度≥96%。结构中同时具备乙酰基、羧酸甲酯和吲哚酮官能团，使其兼具亲脂性与反应活性，易溶于二甲基亚砜（DMSO）、甲醇等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚衍生物，是合成生物活性分子的关键中间体。其结构中的 α-羰基酰胺和酯基可作为药物化学中的药效团，参与多种偶联反应。在天然产物全合成中，常用于构建含吲哚酮结构的生物碱类化合物，如抗菌剂或抗肿瘤先导物的修饰位点。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品主要用于：1) 蛋白酶抑制剂类药物的结构修饰；2) 激酶靶向化合物的合成前体；3) 荧光探针标记物的制备。工业应用中，可作为有机光电材料的合成单元。实验室级产品适用于高通量筛选和构效关系研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃干燥避光保存，开封后需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温以避免结露，称量应在通风橱中进行。溶解推荐使用无水级溶剂，配制成溶液后建议现配现用，长期保存需分装冻存。避免与强氧化剂、强酸强碱接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%，批号关联 COA 报告。安全数据：1) GHS 分类为刺激性 (Category 2)，操作时需佩戴护目镜及防尘口罩；2) 皮肤接触后应立即用肥皂水冲洗；3) 废弃物处置需符合危险化学品管理条例。详细毒理学数据参见随货 MSDS 文件。

注：本说明仅限专业研究人员参考，不可替代实验方案设计。具体应用需结合文献方法验证。