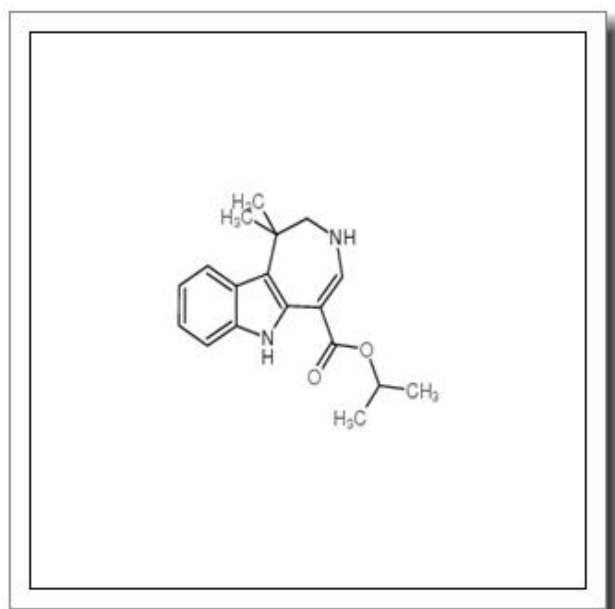


1,2,3,6-四氢-1,1-二甲基-氮杂卓酮[4,5-B]吲哚-5-羧酸-1-甲基乙酯

propan-2-yl 1,1-dimethyl-3,6-dihydro-2H-azepino[4,5-b]indole-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	propan-2-yl 1,1-dimethyl-3,6-dihydro-2H-azepino[4,5-b]indole-5-carboxylate
中文名称	1,2,3,6-四氢-1,1-二甲基-氮杂卓酮[4,5-B]吲哚-5-羧酸-1-甲基乙酯
CAS 号	942145-77-9
分子式	C18H22N2O2
分子量	298.379
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 1,2,3,6-四氢-1,1-二甲基-氮杂卓酮[4,5-B]吲哚-5-羧酸-1-甲基乙酯（化学名称：propan-2-yl 1,1-dimethyl-3,6-dihydro-2H-azepino[4,5-b]indole-5-carboxylate），CAS 号 942145-77-9，分子式 C₁₈H₂₂N₂O₂，分子量 298.379。该化合物是一种含氮杂环衍生物，结构融合了吲哚与氮杂卓酮骨架，纯度≥96%，常温下呈白色至类白色结晶或粉末状，具有特定的紫外吸收特性。其化学稳定性良好，但需避光保存以防光解。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚类生物碱的结构类似物，可能参与调控神经递质受体或酶活性，在药物化学研究中具有潜在价值。其分子结构中的羧酸酯基团和刚性杂环体系使其成为先导化合物优化的关键中间体，尤其适用于中枢神经系统（CNS）靶向药物的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，具体包括：

- 1) 作为新型精神类药物（如 5-HT 受体调节剂）的合成前体；
- 2) 用于构建多靶点抗抑郁或抗焦虑化合物的核心骨架；
- 3) 在有机合成中作为手性催化剂或配体的研究原料。实验室使用时需严格遵循合成方案，推荐浓度范围为 0.1-10 mM。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、密闭避光环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装保存，避免反复冻融。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，溶解推荐采用无水 DMSO 或乙醇。操作人员应穿戴防护手套、护目镜及实验服，防止吸入或皮肤接触。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度≥96%，批次间差异控制在±1%以内。安全数据表明，其急性毒性（LD₅₀）尚未完全明确，故按潜在有害物质处理。废弃处置需符合危险化学品

规范，避免直接排放至环境中。如发生泄漏，应立即用惰性吸附材料处理，并用大量水冲洗污染区域。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗人类疾病。具体实验方案请参阅相关文献或咨询专业毒理学家。