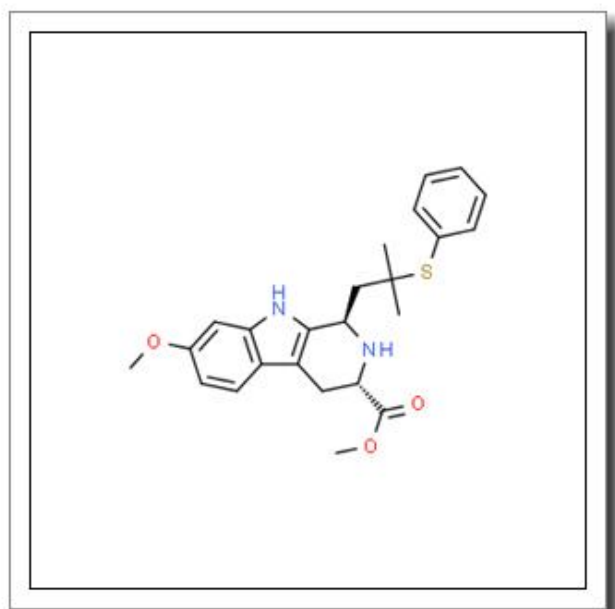


(1R,3S)-7-甲氧基-1-(2-甲基-2-(苯硫基)丙基)-2,3,4,9-四氢-1H-吡啶并

1H-Pyrido[3,4-b]indole-3-carboxylic acid, 2,3,4,9-tetrahydro-7-methoxy-1-[2-methyl-2-(phenylthio)propyl]-, methyl ester, (1R,3S)-



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrido[3,4-b]indole-3-carboxylic acid, 2,3,4,9-tetrahydro-7-methoxy-1-[2-methyl-2-(phenylthio)propyl]-, methyl ester, (1R,3S)-
中文名称	(1R,3S)-7-甲氧基-1-(2-甲基-2-(苯硫基)丙基)-2,3,4,9-四氢-1H-吡啶并
CAS 号	111427-93-1
分子式	C ₂₄ H ₂₈ N ₂ O ₃ S
分子量	424.55572
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(1R, 3S)-7-甲氧基-1-(2-甲基-2-(苯硫基)丙基)-2, 3, 4, 9-四氢-1H-吡啶并[3, 4-b]吡啶-3-羧酸甲酯, 化学式为 C₂₄H₂₈N₂O₃S, 分子量 424.55572, CAS 号 111427-93-1。其结构包含吡啶并吡啶骨架、甲氧基及苯硫基丙基等特征基团, 纯度 ≥96%, 为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定立体构型 (1R, 3S), 在有机溶剂如甲醇、DMSO 中溶解性良好, 但难溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物属于 β-咪啉类衍生物, 可通过与特定受体 (如 5-HT 或 MAO) 相互作用调控神经递质代谢, 或作为酶抑制剂干扰信号通路。其苯硫基和甲氧基结构赋予其亲脂性及电子效应, 在药物化学中常用于先导化合物优化, 尤其在中枢神经系统药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体, 主要用于以下领域:

- 药物研发: 用于合成抗抑郁、抗焦虑或神经保护类候选药物。
- 生化研究: 作为探针分子研究 5-羟色胺受体或单胺氧化酶的构效关系。
- 有机合成: 作为手性砌块构建复杂杂环化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体 (如氩气) 环境中, 长期保存建议分装密封。使用时需在干燥氮气环境下操作, 避免反复冻融。溶解建议选用无水 DMSO, 配制后溶液需现配现用, 防止水解或氧化。

5. 质量控制与安全信息

HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地法规, 禁止直接排放至环境中。

(注: 实际应用中需结合具体实验目的查阅文献, 优化使用条件。)