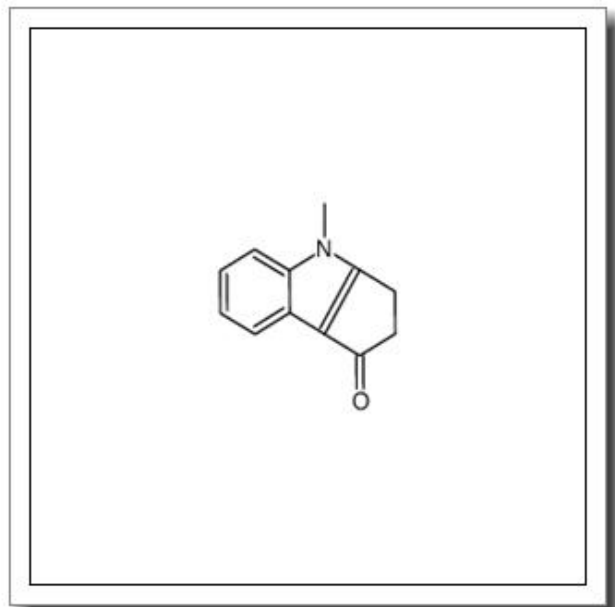


4-甲基-3,4-二氢环戊烯并[B]吲哚-1(2H)-酮

4-methyl-2,3-dihydrocyclopenta[b]indol-1-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-methyl-2,3-dihydrocyclopenta[b]indol-1-one
中文名称	4-甲基-3,4-二氢环戊烯并[B]吲哚-1(2H)-酮
CAS 号	50776-26-6
分子式	C ₁₂ H ₁₁ N ₁ O
分子量	185.222
纯度	≥96%

产品说明

4-甲基-3,4-二氢环戊烯并[B]吲哚-1(2H)-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-methyl-2,3-dihydrocyclopenta[b]indol-1-one, CAS 号为 50776-26-6, 分子式 C₁₂H₁₁N₀, 分子量 185.222。该化合物为吲哚类衍生物, 具有稠合环戊烯酮结构, 纯度≥96%, 常温下呈白色至淡黄色结晶粉末。其独特的多环结构赋予其良好的脂溶性和稳定性, 在有机溶剂如甲醇、乙醇中溶解性良好, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚生物碱类化合物的合成前体, 该分子结构中的共轭体系使其具有显著的电子离域特性, 可作为药物活性分子的核心骨架。其环戊烯酮片段能够参与多种亲核加成反应, 而吲哚环则保留了典型的芳香性和氢键结合能力, 在生物活性分子设计中具有重要价值。该化合物已被报道用于 5-HT 受体调节剂和激酶抑制剂的研发。

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) 抗抑郁药物中间体合成; 2) 神经退行性疾病相关化合物的结构修饰; 3) 蛋白激酶抑制剂的先导化合物优化。在材料科学中, 可用作有机光电材料的构建单元。实验室应用中, 常作为: 1) 多环杂环化合物的合成砌块; 2) 荧光探针的母核结构; 3) 不对称催化反应的手性配体前体。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于密闭容器中, 置于-20℃干燥避光环境, 惰性气体保护可延长保存期限。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行, 建议使用丁腈手套和防护眼镜。溶解时优先选用无水 DMSO 或 THF, 配制溶液建议现配现用, 长期保存需加入稳定剂并冷冻避光。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%, 重金属含量<10ppm, 水分含量<0.5%。安全数据表明该物质可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应避免直接接触。急性毒性 LD₅₀ (大

鼠经口) 为 1200mg/kg, 属于低毒类化合物。废弃物处理需符合当地法规, 建议采用专业化学废弃物回收方式。详细安全信息请参阅随附的 MSDS 文件。