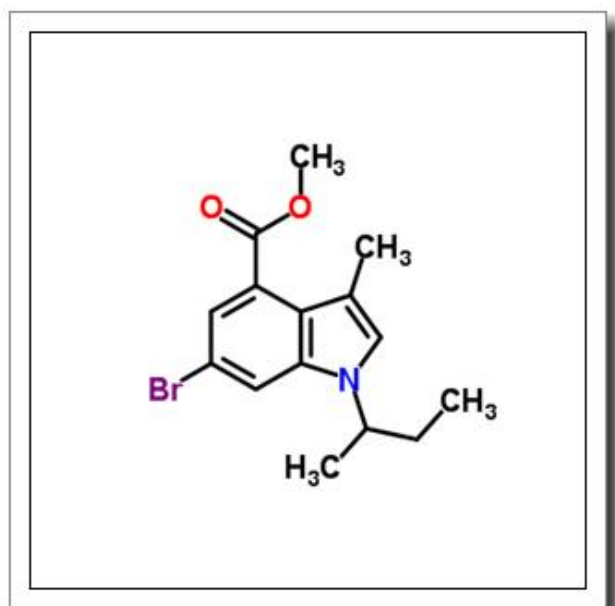


Methyl 6-bromo-1-sec-butyl-3-methyl-1H-indole-4-carboxylate

Methyl 6-bromo-1-sec-butyl-3-methyl-1H-indole-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 6-bromo-1-sec-butyl-3-methyl-1H-indole-4-carboxylate
中文名称	Methyl 6-bromo-1-sec-butyl-3-methyl-1H-indole-4-carboxylate
CAS 号	1346576-39-3
分子式	C ₁₅ H ₁₈ BrN ₂ O ₂
分子量	324. 213
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

Methyl 6-bromo-1-sec-butyl-3-methyl-1H-indole-4-carboxylate (CAS 号: 1346576-39-3) 是一种结构复杂的吲哚类衍生物, 分子式为 $C_{15}H_{18}BrNO_2$, 分子量为 324.213。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构特征包括吲哚环上的溴取代基 (6 位)、仲丁基 (1 位) 和甲基酯基 (4 位), 这些官能团赋予其独特的化学反应性和溶解性 (易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇)。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚骨架的修饰产物, 该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。溴原子的引入增强了其作为亲电试剂的活性, 而酯基则提供了进一步衍生化的位点。研究表明, 类似结构的吲哚衍生物可参与激酶抑制、受体拮抗等生物过程, 潜在应用于抗肿瘤或抗炎药物的中间体合成。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- (1) 医药研发: 作为构建复杂杂环化合物的关键中间体, 用于开发靶向治疗药物;
- (2) 材料科学: 用于合成具有光电性能的功能性高分子材料;
- (3) 学术研究: 作为探针分子研究吲哚类化合物的结构与活性关系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体 (如氩气) 环境下长期储存。开封后需充氮密封, 防止吸湿和氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试表明, 推荐使用无水 DMSO 配制母液 (浓度 $\leq 10\text{ mM}$), 避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间一致性。安全数据表明, 其急性毒性 (LD_{50}) 尚未完全表征, 但应视为有害物质 (GHS 分类: H302-

H315-H319)。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，转移至空气新鲜处。
废弃物处理需符合当地危险化学品法规。

（注：实际应用中需结合具体实验目的进一步优化条件，建议参考文献报道的合成或应用案例。）