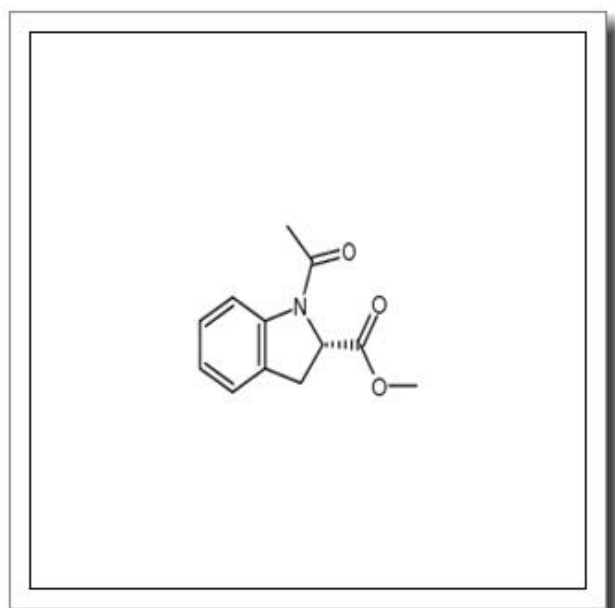


# methyl (S)-N-acetylintoline-2-carboxylate

*methyl (S)-N-acetylintoline-2-carboxylate*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | methyl (S)-N-acetylintoline-2-carboxylate                     |
| 中文名称  | methyl (S)-N-acetylintoline-2-carboxylate                     |
| CAS 号 | 110592-39-7   |
| 分子式   | C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> |
| 分子量   | 219.237   |
| 纯度    | ≥ 96%   |

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

甲基(S)-N-乙酰基吲哚啉-2-羧酸酯 (methyl (S)-N-acetylidoline-2-carboxylate) 是一种具有光学活性的杂环化合物, 化学式为 C<sub>12</sub>H<sub>13</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>, 分子量为 219.237, CAS 号为 110592-39-7。该化合物属于吲哚啉衍生物, 结构中包含一个乙酰基保护的氨基和一个甲酯基团, 其(S)-构型在不对称合成中具有重要价值。产品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 ≥96%, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成手性药物和生物活性分子的关键中间体, 尤其在构建含吲哚啉骨架的天然产物和药物分子中广泛应用。其乙酰基和酯基的活性位点可通过水解、还原或偶联反应进一步修饰, 为手性催化、药物研发及功能材料研究提供重要砌块。在生物化学研究中, 它还可作为探针分子用于酶抑制机制或受体结合实验。

### 3. 主要应用领域与具体用途

甲基(S)-N-乙酰基吲哚啉-2-羧酸酯主要用于以下领域:

- 药物化学: 作为抗肿瘤、抗炎或神经活性药物 (如 NK1 受体拮抗剂) 的合成前体。
- 不对称催化: 作为手性配体或催化剂组分参与立体选择性反应。
- 材料科学: 用于制备荧光标记物或功能性高分子单体。

具体实验中, 建议通过核磁共振 (NMR) 或高效液相色谱 (HPLC) 验证其光学纯度和反应转化率。

### 4. 储存条件与使用建议

产品需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐储存温度为 2-8°C (长期) 或 -20°C (长期稳定)。开封后应充入惰性气体 (如氮气) 以防止氧化。使用前需恢复至室温, 避免反复冻融。实验操作建议在通风橱中进行, 并佩戴防护手套和护目镜。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 和质谱 (MS) 严格检测, 确保纯度  $\geq 96\%$ , 且符合企业内控标准。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD50 未明确), 但仍可能引起皮肤或眼睛刺激。若不慎接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵循当地法规, 避免直接排放至环境中。

(注: 以上信息基于现有研究数据, 具体应用需结合实验条件进一步优化。)