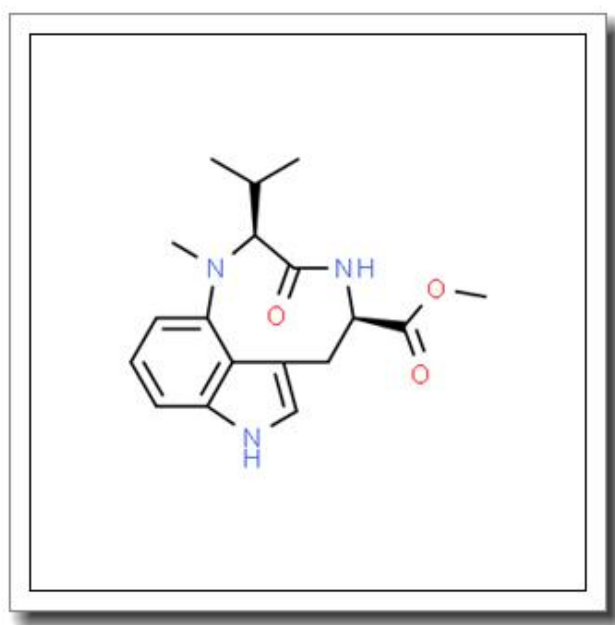


甲基(2S,5R)-2-异丙基-1-甲基-3-氧代-2,3,4,5,6,8-六氢-1H-[1,4]重氮基[7,6,5-CD]吲哚-5-羧酸盐

Methyl (2S, 5R)-2-isopropyl-1-methyl-3-oxo-2, 3, 4, 5, 6, 8-hexahydro-1H-[1, 4]diazonino[7, 6, 5-cd]indole-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl (2S, 5R)-2-isopropyl-1-methyl-3-oxo-2, 3, 4, 5, 6, 8-hexahydro-1H-[1, 4]diazonino[7, 6, 5-cd]indole-5-carboxylate
中文名称	甲基(2S, 5R)-2-异丙基-1-甲基-3-氧代-2, 3, 4, 5, 6, 8-六氢-1H-[1, 4]重氮基[7, 6, 5-CD]吲哚-5-羧酸盐
CAS 号	1097985-47-1
分子式	C ₁₈ H ₂₃ N ₃ O ₃
分子量	329.39

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为甲基(2S, 5R)-2-异丙基-1-甲基-3-氧代-2, 3, 4, 5, 6, 8-六氢-1H-[1, 4]重氮基[7, 6, 5-cd]吡啶-5-羧酸盐 (CAS 号: 1097985-47-1), 化学式为 C₁₈H₂₃N₃O₃, 分子量 329.39。其结构融合了吡啶骨架与重氮杂环, 具有独特的手性中心 (2S, 5R 构型) 和酯基官能团。产品纯度 ≥96%, 为白色至类白色结晶粉末, 可溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为复杂杂环衍生物, 其结构特征使其成为药物化学中重要的中间体或活性分子前体。吡啶核心与重氮杂环的组合可能赋予其与生物靶点 (如激酶或 G 蛋白偶联受体) 的相互作用潜力, 在调节细胞信号通路中具有潜在应用价值。手性中心的保留对立体选择性生物活性至关重要。

3. 主要应用领域与具体用途

目前主要应用于以下领域:

- 医药研发: 作为抗肿瘤或神经活性化合物的关键合成砌块, 用于先导化合物优化。
- 学术研究: 用于探索新型杂环分子的构效关系及生物活性机制。
- 化学合成: 作为手性模板参与不对称催化反应或复杂天然产物全合成。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中, 有效期 24 个月。开封后建议分装使用以避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行, 佩戴防护手套及护目镜。溶解时优先选用氩气保护的干燥 DMSO, 配制后溶液建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 验证纯度 ≥96%, 批次检测包括熔点、旋光度及残留溶剂分析。安全数据表明其可能具有刺激性, 避免吸入粉尘或接触皮肤。急性毒性数据尚未完全建立, 建议按潜在有害化学品处理。废弃物处置需符合危险化学品管理条例。

注：具体实验应用需结合文献方法验证，非专业人士请在指导下使用。