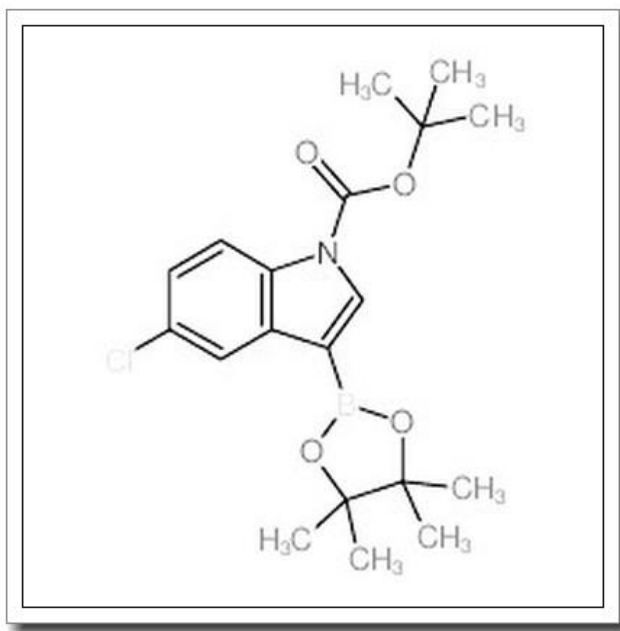


1-BOC-5-氯吲哚-3-硼酸频那醇酯

tert-Butyl 5-chloro-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole-1-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | <i>tert-Butyl 5-chloro-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole-1-carboxylate</i> |
| 中文名称 | 1-BOC-5-氯吲哚-3-硼酸频那醇酯 |
| CAS 号 | 1218790-30-7 |
| 分子式 | C ₁₉ H ₂₅ BClN ₀₄ |
| 分子量 | 377.67 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1-BOC-5-氯吲哚-3-硼酸频那醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-Butyl 5-chloro-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole-1-carboxylate, 是一种重要的硼酸酯类化合物。其分子式为 C₁₉H₂₅BClN₀₄, 分子量为 377.67, CAS 号为 1218790-30-7。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度高于 96%, 结构中含有吲哚骨架、BOC 保护基团及硼酸频那醇酯基团, 具有良好的化学稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类硼酸酯衍生物, 该化合物在有机合成中表现出显著的偶联反应活性, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体。其 BOC 保护基团可增强溶解性并提高反应选择性, 而硼酸酯基团则为碳-碳键的形成提供了高效途径。这类结构在药物化学和材料科学中具有重要价值, 常用于构建复杂杂环体系。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中, 它是制备 5-氯吲哚类生物活性分子的关键砌块, 可用于抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的开发。在材料科学中, 可作为有机光电材料的合成前体。具体用途包括但不限于: Suzuki 偶联反应底物、多步合成中间体、以及靶向分子库的构建。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 以下避光干燥储存, 长期保存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在惰性气氛 (如氮气或氩气) 下操作, 防止硼酸酯水解。溶解推荐使用无水 THF、DMSO 或二氯甲烷等惰性溶剂。实验人员需佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 及质谱进行严格质量控制, 确保批次间一致性。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应避免直接接触。如

发生泄漏，需用惰性吸附材料处理。废弃物应按照危险化学品处置规范处理，不得直接排入环境。更多安全细节请参阅随货提供的MSDS（材料安全数据表）。

注：本说明基于现有实验数据编写，实际应用前建议进行小试验证。产品规格可能因技术升级调整，恕不另行通知。