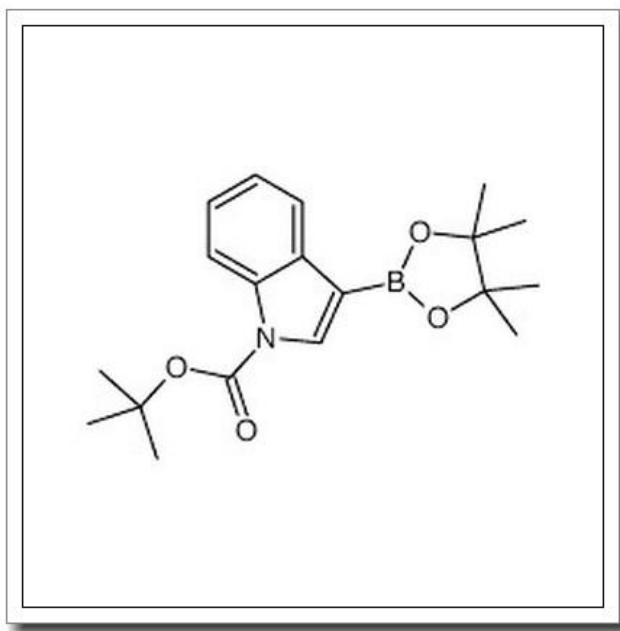


1-BOC-吲哚-3-硼酸

tert-Butyl 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 3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-BOC-吲哚-3-硼酸
CAS 号	942070-45-3
分子式	C ₁₉ H ₂₆ BN ₀ O ₄
分子量	343.225
纯度	>96%

产品说明

1-BOC-吲哚-3-硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-BOC-吲哚-3-硼酸（化学名称：tert-Butyl 3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole-1-carboxylate）是一种重要的有机硼酸酯衍生物，CAS 号为 942070-45-3，分子式为 C₁₉H₂₆BN₀₄，分子量为 343.225。该化合物在常温下为白色至类白色固体，纯度通常高于 96%。其结构中的 BOC（叔丁氧羰基）保护基和硼酸酯官能团使其在有机合成中具有高度反应活性，尤其适用于 Suzuki-Miyaura 偶联反应等过渡金属催化反应。

2. 生物化学功能与重要性

1-BOC-吲哚-3-硼酸是吲哚类化合物的关键中间体，吲哚结构广泛存在于天然产物和药物分子中，如血清素、褪黑激素及多种抗癌药物。硼酸酯基团的引入显著增强了其参与交叉偶联反应的能力，为构建复杂杂环体系提供了高效途径。该化合物在药物研发和材料科学领域具有重要价值，尤其适用于靶向分子的模块化合成。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成、材料科学研究和有机方法学开发。具体用途包括：作为 Suzuki 偶联反应的关键底物，用于构建含吲哚骨架的候选药物分子；在荧光材料或 OLED 材料合成中作为功能化砌块；还可用于 PROTAC（蛋白降解靶向嵌合体）技术中的连接子设计。其 BOC 保护基可在酸性条件下选择性脱除，进一步拓展了合成应用场景。

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（如氮气或氩气）。开封后应避免反复冻融，以防止吸湿降解。使用前需恢复至室温并在手套箱中操作，若发现结块现象可通过温和加热（≤40° C）溶解于无水有机溶剂（如 THF 或 DMSO）。反应体系中需严格除氧，建议搭配钯催化剂（如 Pd(PPh₃)₄）使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制，确保纯度>96%。潜在危害包括：对眼睛和皮肤有刺激性，可能引起呼吸道过敏。操作时应佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中进行。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品处理规范处置，避免与强氧化剂接触。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。）