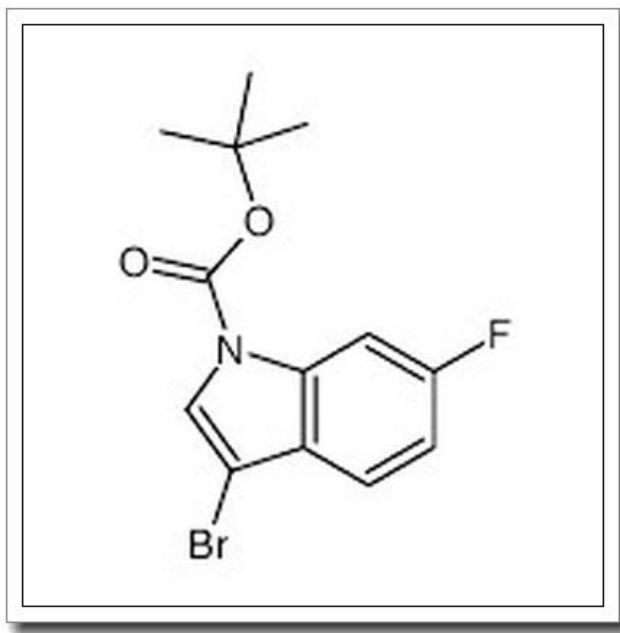


1-Boc-3-溴-6-氟吲哚

2-Methyl-2-propanyl 3-bromo-6-fluoro-1H-indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl 3-bromo-6-fluoro-1H-indole-1-carboxylate
中文名称	1-Boc-3-溴-6-氟吲哚
CAS 号	1314406-46-6
分子式	C ₁₃ H ₁₃ BrFN ₂ O ₂
分子量	314.15
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Boc-3-溴-6-氟吲哚（化学名称：2-Methyl-2-propanyl 3-bromo-6-fluoro-1H-indole-1-carboxylate）是一种重要的吲哚类衍生物，CAS 号为 1314406-46-6，分子式为 C₁₃H₁₃BrFN₂O₂，分子量为 314.15。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在，纯度通常高于 96%。其结构中的 Boc（叔丁氧羰基）保护基和溴、氟取代基使其在有机合成和药物化学中具有独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚骨架的修饰衍生物，在生物活性分子设计中具有关键作用。溴原子的引入增强了其作为亲电试剂的反应性，而氟原子的存在则可能改善化合物的脂溶性和代谢稳定性。Boc 保护基的引入使其在固相合成和多步反应中表现出优异的稳定性，尤其适用于肽类化合物和杂环药物的中间体制备。

3. 主要应用领域与具体用途

1-Boc-3-溴-6-氟吲哚广泛应用于药物研发和有机合成领域。在抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物研究中，它常作为关键中间体用于构建含吲哚结构的活性分子。此外，该化合物还可用于荧光探针的合成以及材料科学中的功能分子修饰。具体用途包括但不限于：蛋白酶抑制剂前体的合成、激酶抑制剂的结构优化以及生物标记物的开发。

4. 储存条件与使用建议

本品应密封保存于干燥、避光的环境中，推荐储存温度为 -20° C 至 4° C，长期储存需充入惰性气体（如氮气）以保持稳定性。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风良好的实验室环境中进行，佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明，该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 ≥96%。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。如不慎接触，需立即

用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，建议通过专业化学废弃物处理机构回收。详细安全信息请参考产品提供的材料安全数据表（MSDS）。