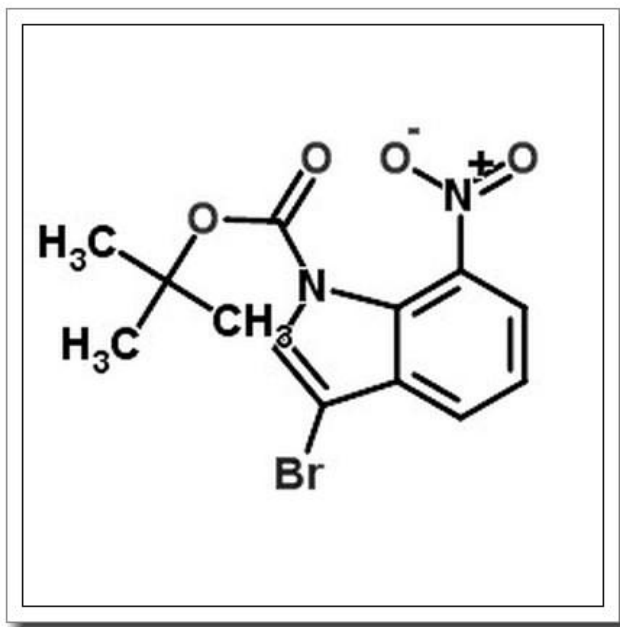


1-Boc-3-溴-7-硝基吲哚

tert-butyl 3-bromo-7-nitroindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-bromo-7-nitroindole-1-carboxylate
中文名称	1-Boc-3-溴-7-硝基吲哚
CAS 号	914349-37-4
分子式	C ₁₃ H ₁₃ BrN ₂ O ₄
分子量	341.157
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Boc-3-溴-7-硝基吲哚 (tert-butyl 3-bromo-7-nitroindole-1-carboxylate) 是一种重要的吲哚类衍生物, CAS 号为 914349-37-4, 分子式为 C₁₃H₁₃BrN₂O₄, 分子量为 341.157。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、溴原子和硝基官能团赋予其较高的反应活性, 使其成为有机合成和药物化学中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

1-Boc-3-溴-7-硝基吲哚在生物化学领域具有重要价值。其吲哚骨架是许多天然产物和药物的核心结构, 而溴原子和硝基的存在使其易于进一步功能化, 例如通过偶联反应或亲核取代反应引入其他基团。该化合物常用于构建复杂的杂环化合物, 尤其在抗癌、抗炎和神经活性分子的研发中具有广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体和有机合成领域。具体用途包括: 作为吲哚类衍生物合成的关键原料; 用于构建多取代吲哚结构, 以开发新型药物分子; 在激酶抑制剂和 GPCR 调节剂的研发中作为重要中间体。此外, 其硝基和溴原子可作为反应位点, 参与钯催化的交叉偶联反应, 如 Suzuki 偶联或 Buchwald-Hartwig 偶联。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。储存温度应控制在 2-8° C, 以保持其稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 避免与强氧化剂或强酸接触。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在通风橱中处理。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 纯度 ≥96%。安全信息方面, 该化合物可能对皮肤、眼睛和呼吸系统造成刺激, 操作时应避免直接接触。如不慎接触, 应立即用大

量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，不可随意丢弃。运输时需符合化学品运输规范，避免与不相容物质混装。