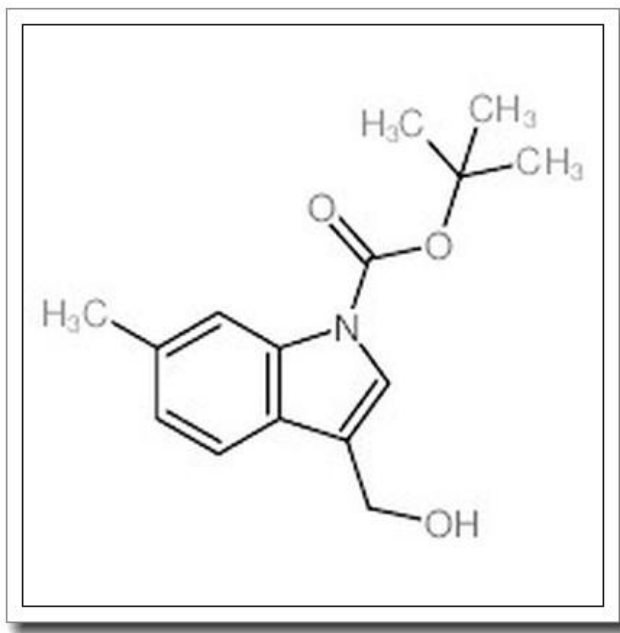


# 1-Boc-3-羟基甲基-6-甲基吲哚

*tert-butyl 3-(hydroxymethyl)-6-methylindole-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-(hydroxymethyl)-6-methylindole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-3-羟基甲基-6-甲基吲哚
CAS 号	914349-04-5
分子式	C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	261.316
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-Boc-3-羟基甲基-6-甲基吲哚（化学名称: tert-butyl 3-(hydroxymethyl)-6-methylindole-1-carboxylate）是一种重要的吲哚类衍生物，CAS 号为 914349-04-5，分子式为 C<sub>15</sub>H<sub>19</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量为 261.316。该化合物以白色至类白色固体形式存在，纯度通常高于 96%。其结构特征为吲哚环上 3 位带有羟甲基、6 位带有甲基，1 位被 Boc（叔丁氧羰基）保护基团修饰，具有良好的化学稳定性和反应活性，适用于多种有机合成反应。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚骨架的衍生物，在生物活性分子构建中具有重要作用。吲哚结构广泛存在于天然产物和药物分子中，例如血清素、褪黑素等。Boc 保护基的引入增强了其稳定性，便于在复杂合成中作为中间体使用。羟甲基的官能团为进一步衍生化（如氧化、酯化或醚化）提供了关键位点，使其成为药物研发和生物标记物合成中的重要砌块。

### 3. 主要应用领域与具体用途

1-Boc-3-羟基甲基-6-甲基吲哚主要用于医药和有机合成领域。在药物研发中，它可作为合成抗肿瘤、抗炎或神经系统药物（如 5-HT 受体调节剂）的关键中间体。此外，在材料科学中，该化合物可用于制备功能化高分子或荧光探针。其具体用途包括：

- 作为 Boc 保护的吲哚衍生物，用于多肽固相合成中的保护基策略。
- 通过羟甲基的进一步修饰，构建复杂杂环化合物。
- 在激酶抑制剂或 GPCR 靶向药物的结构优化中作为核心骨架。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 -20° C 或更低温度的干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体（如氮气）以延长稳定性。使用前需恢复至室温并充分干燥，防

止吸湿影响反应效率。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 >96%，并提供详细的质谱和核磁数据支持。安全信息如下：

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。
- 若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃处理需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合文献和实际条件优化。