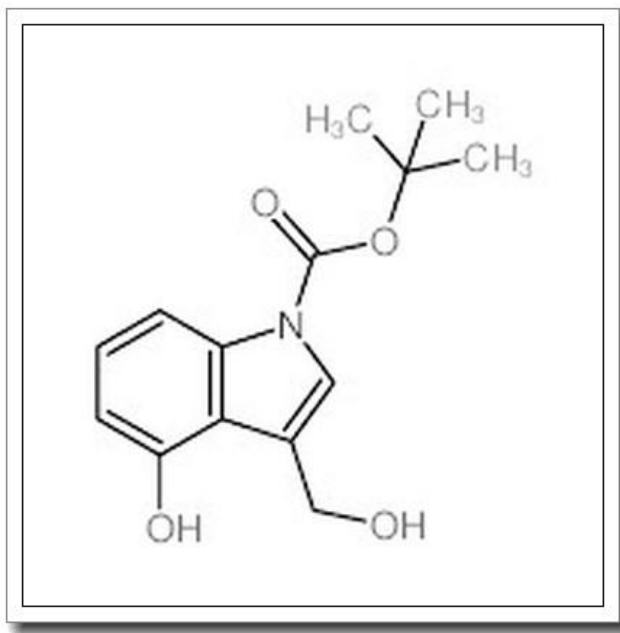


1-Boc-4-羟基-3-羟甲基吲哚

tert-butyl 4-hydroxy-3-(hydroxymethyl) indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-hydroxy-3-(hydroxymethyl) indole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-4-羟基-3-羟甲基吲哚
CAS 号	914349-12-5
分子式	C ₁₄ H ₁₇ N ₁ O ₄
分子量	263.289
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 4-hydroxy-3-(hydroxymethyl)indole-1-carboxylate (中文名称: 1-Boc-4-羟基-3-羟甲基吲哚, CAS 号: 914349-12-5) 是一种重要的吲哚衍生物, 分子式为 C₁₄H₁₇N₀₄, 分子量为 263.289。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构特征包括吲哚环上的 4-羟基和 3-羟甲基取代基, 以及 1 位上的 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团。Boc 基团的引入增强了化合物的稳定性, 使其在有机合成和药物化学中具有广泛的应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

1-Boc-4-羟基-3-羟甲基吲哚是合成多种生物活性分子的关键中间体, 尤其在吲哚类化合物的修饰中扮演重要角色。其羟基和羟甲基官能团为后续的衍生化反应提供了灵活的位点, 可用于构建更复杂的分子结构。此外, Boc 保护基的存在使其在酸性条件下易于脱保护, 从而在肽类化合物和药物分子的合成中具有独特优势。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于药物研发、有机合成和生物化学研究领域。在药物化学中, 它是合成抗肿瘤、抗炎和神经活性药物的重要中间体。在有机合成中, 可用于构建多官能团化的吲哚骨架, 为天然产物全合成提供关键模块。此外, 它还用于荧光探针和生物标记物的开发, 因其结构可修饰性强, 能够与多种功能基团结合。

4. 储存条件与使用建议

为确保产品的稳定性和活性, 建议在 -20°C 下避光干燥储存, 长期保存需置于惰性气体 (如氮气) 环境中。使用前应恢复至室温并避免反复冻融。溶解时推荐使用极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇或二氯甲烷), 具体溶剂选择需根据实验需求确定。操作时需在通风良好的环境下进行, 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 和 NMR 严格检测, 确保纯度高于 96%。使用时需佩戴适当的个人防护装备 (如手套、护目镜和实验服)。其安全数据表 (MSDS) 显示, 该化合物可

能对眼睛和皮肤有刺激性，误接触后应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地化学品管理法规，避免环境污染。