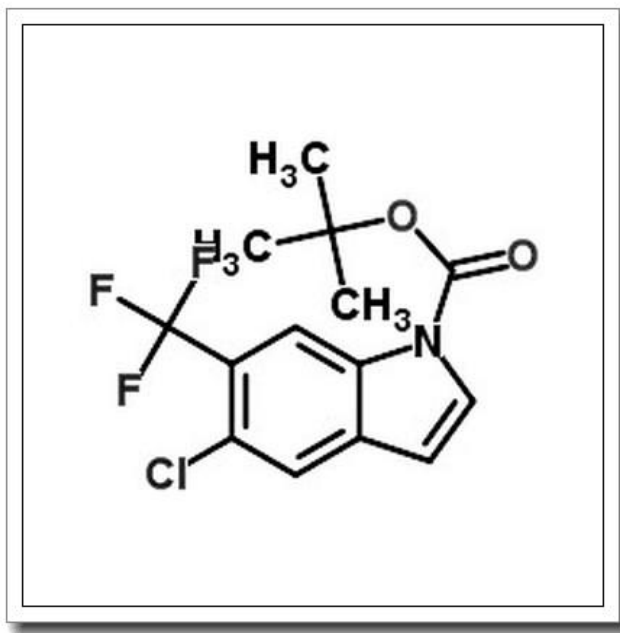


1-Boc-5-氯-6-三氟甲基-1H-吲哚

tert-butyl 5-chloro-6-(trifluoromethyl)indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 5-chloro-6-(trifluoromethyl)indole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-5-氯-6-三氟甲基-1H-吲哚
CAS 号	1209101-50-7
分子式	C ₁₄ H ₁₃ ClF ₃ N ₂ O ₂
分子量	319.707
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl 5-chloro-6-(trifluoromethyl)indole-1-carboxylate (1-Boc-5-氯-6-三氟甲基-1H-吲哚)，CAS 号 1209101-50-7，分子式 C₁₄H₁₃ClF₃N₂O₂，分子量 319.707。其结构中包含吲哚骨架、三氟甲基及氯取代基，Boc 保护基赋予其良好的稳定性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于有机溶剂如 DMSO、二氯甲烷，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类衍生物，该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。三氟甲基的强吸电子效应及氯原子的定位作用，使其在药物化学中具有独特价值，常用于调节化合物的脂溶性、代谢稳定性及靶标亲和性。Boc 保护基可选择性脱除，便于后续官能团修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发与有机合成领域，具体包括：

- 抗肿瘤及抗病毒药物先导化合物的结构修饰
- 作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的核心骨架
- 用于荧光探针或材料科学的含氟功能分子合成

典型反应涉及 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，避免光照与潮湿。使用前需恢复至室温并短暂氮气吹扫。建议在通风橱中操作，佩戴防护手套与护目镜。开封后建议分装使用，剩余物料需立即充氮密封。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、NMR 及质谱验证数据。本品对眼睛、皮肤有刺激性，MSDS 分类为危险代码 Xi（刺激性）。若不慎接触，需用大量清水冲洗并就

医。废弃物处理需符合当地法规，禁止直接排入下水道。运输时归类为非危险化学品，但需避免与强氧化剂共存。

注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。