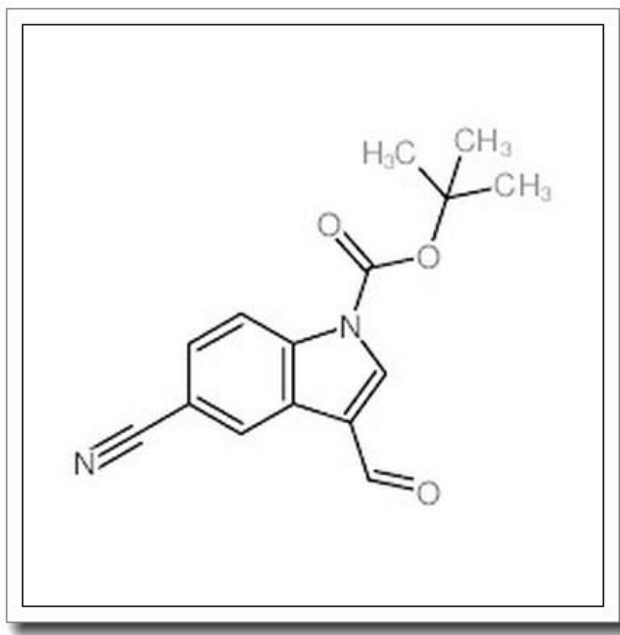


1-Boc-5-氰基-3-甲酰基吲哚

tert-butyl 5-cyano-3-formylindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 5-cyano-3-formylindole-1-carboxylate
中文名称	1-Boc-5-氰基-3-甲酰基吲哚
CAS 号	914348-93-9
分子式	C ₁₅ H ₁₄ N ₂ O ₃
分子量	270.283
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 5-cyano-3-formylindole-1-carboxylate (1-Boc-5-氰基-3-甲酰基吲哚) 是一种重要的吲哚类衍生物, CAS 号为 914348-93-9, 分子式为 C₁₅H₁₄N₂O₃, 分子量为 270.283。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%。其结构中含有氰基、甲酰基和 Boc 保护基团, 具有较高的反应活性, 尤其在有机合成和药物化学中作为关键中间体使用。

2. 生物化学功能与重要性

1-Boc-5-氰基-3-甲酰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, 而氰基和甲酰基的引入进一步增强了其作为合成砌块的多样性。该化合物可用于构建复杂的杂环体系, 尤其在抗肿瘤、抗炎和神经活性药物的研发中表现出潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药中间体、有机合成和材料科学领域。具体用途包括但不限于: 作为多靶点激酶抑制剂的合成前体、用于构建吲哚类生物碱的衍生物、以及作为荧光探针或光电材料的修饰基团。在药物研发中, 它常用于优化先导化合物的活性和选择性。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后应尽快使用, 剩余部分需充入惰性气体 (如氮气) 保护。使用时需在通风良好的环境下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 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, 操作时应佩戴防护手套、护

目镜和防尘口罩。若不慎接触，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，避免环境污染。

以上信息仅供参考，具体实验条件需根据实际需求调整。建议用户在首次使用前查阅相关文献并开展小规模试验以验证适用性。