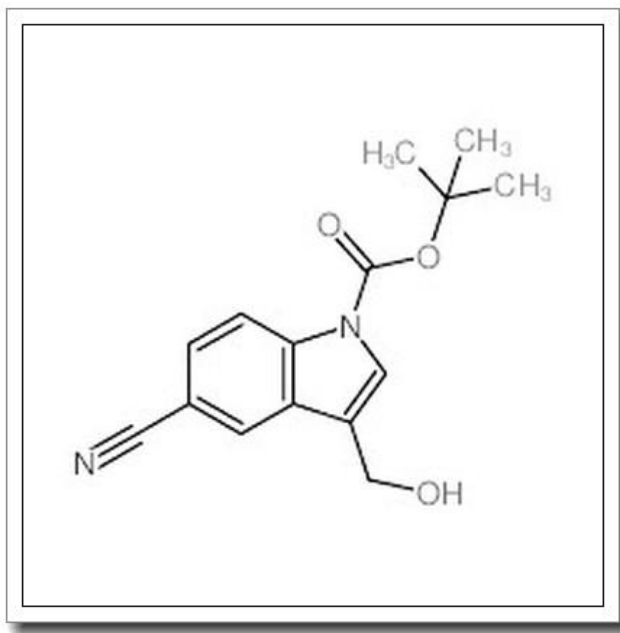


1-Boc-5-氰基-3-羟基甲基吲哚

tert-butyl 5-cyano-3-(hydroxymethyl) indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 5-cyano-3-(hydroxymethyl) indole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-5-氰基-3-羟基甲基吲哚
CAS 号	914349-11-4
分子式	C ₁₅ H ₁₆ N ₂ O ₃
分子量	272.299
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 5-cyano-3-(hydroxymethyl)indole-1-carboxylate (1-Boc-5-氰基-3-羟基甲基吲哚) 是一种重要的吲哚类衍生物, CAS 号为 914349-11-4, 分子式为 C₁₅H₁₆N₂O₃, 分子量为 272.299。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的 Boc 保护基 (叔丁氧羰基) 和氰基、羟基甲基官能团赋予其独特的化学性质, 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-5-氰基-3-羟基甲基吲哚是一种多功能中间体, 其吲哚骨架是许多生物活性分子的核心结构。Boc 保护基的存在增强了化合物的稳定性, 便于后续脱保护反应。氰基和羟基甲基官能团可作为进一步修饰的位点, 用于构建更复杂的分子结构。该化合物在药物研发中常用于合成激酶抑制剂、抗肿瘤药物和神经活性物质, 具有重要的生物医学研究价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药和生物化学研究领域。在药物化学中, 它是合成 5-氰基吲哚类衍生物的关键中间体, 可用于开发抗肿瘤、抗炎和抗病毒药物。在有机合成中, 它可作为构建块用于多步反应, 如 Suzuki 偶联、亲核取代等。此外, 它还用于荧光探针和生物标记物的制备, 因其吲哚结构具有良好的光学特性。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 -20° C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后应尽快使用, 或充入惰性气体 (如氮气) 以延长保存时间。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强酸、强碱或氧化剂接触。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 进行严格质量控制, 确保纯度高于 96%。使用时需穿戴适当的个人防护装备 (如手套、护目镜和实验服), 避

免吸入或接触皮肤。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。该化合物的安全数据表（SDS）提供了详细的毒理学信息和处理指南，使用前应仔细阅读。