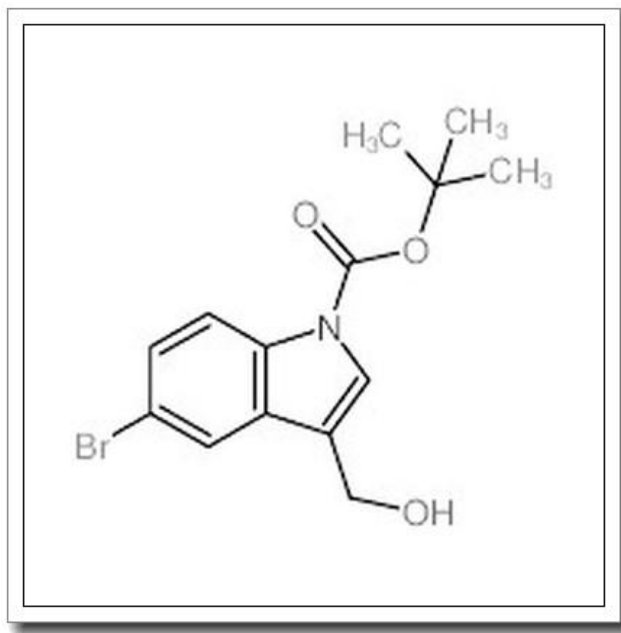


1-Boc-5-溴-3-羟基甲基吲哚

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 5-bromo-3-(hydroxymethyl) indole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-5-溴-3-羟基甲基吲哚
CAS 号	905710-14-7
分子式	C ₁₄ H ₁₆ BrN ₀₃
分子量	326.186
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Boc-5-溴-3-羟基甲基吲哚（化学名称：tert-butyl 5-bromo-3-(hydroxymethyl)indole-1-carboxylate, CAS 号：905710-14-7）是一种重要的吲哚类衍生物，分子式为 C₁₄H₁₆BrN₀₃，分子量为 326.186。该化合物以白色至类白色固体形式存在，纯度高于 96%。其结构特征包括吲哚环上的 5 位溴取代基、3 位羟甲基以及 1 位 Boc（叔丁氧羰基）保护基团，这些官能团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

该化合物作为吲哚骨架的修饰衍生物，是合成多种生物活性分子的关键中间体。Boc 保护基的存在增强了其化学稳定性，便于后续脱保护反应。5 位溴原子为后续偶联反应（如 Suzuki 偶联）提供了活性位点，而 3 位羟甲基可通过进一步官能团化引入多样结构。这类吲哚衍生物在药物研发中常用于构建激酶抑制剂、抗肿瘤化合物及神经递质类似物。

3. 主要应用领域与具体用途

1-Boc-5-溴-3-羟基甲基吲哚广泛应用于医药和材料科学领域。在药物化学中，它是合成 5-溴吲哚类药物的关键前体，例如用于开发抗炎、抗病毒或抗肿瘤活性分子。此外，该化合物还可作为荧光探针或有机发光材料的构建模块。具体用途包括：

- 作为有机合成中间体，用于构建复杂杂环化合物。
- 在药物发现中用于结构-活性关系（SAR）研究。
- 作为功能材料的前体，如光电材料或配体设计。

4. 储存条件与使用建议

为确保产品稳定性，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。开封后应避免反复冻融，并密封保存以防吸湿。使用时需在干

燥环境下操作，避免与强氧化剂或酸碱接触。溶解推荐使用二甲基亚砜（DMSO）或二氯甲烷等有机溶剂，溶液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，并提供 COA（质量分析证书）。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、护目镜及防尘口罩。
- 若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物处理需符合当地化学品管理法规，避免环境污染。
- 安全术语参考：H315（造成皮肤刺激）、H319（造成严重眼刺激）、H335（可能引起呼吸道刺激）。