

1-Boc-5-甲基-3-甲酰基吲哚

tert-butyl 3-formyl-5-methylindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-formyl-5-methylindole-1-carboxylate
中文名称	1-Boc-5-甲基-3-甲酰基吲哚
CAS 号	914348-94-0
分子式	C ₁₅ H ₁₇ N ₃ O ₃
分子量	259.3
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Boc-5-甲基-3-甲酰基吲哚（化学名称: tert-butyl 3-formyl-5-methylindole-1-carboxylate, CAS 号: 914348-94-0）是一种重要的吲哚类衍生物，分子式为 C₁₅H₁₇N₃O₃，分子量为 259.3。该化合物以白色至淡黄色结晶或粉末形式存在，纯度通常高于 96%。其结构特征为吲哚环上 5 位甲基和 3 位甲酰基的取代，同时 1 位氮原子被 Boc（叔丁氧羰基）保护，赋予其良好的稳定性和反应活性。

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，在有机合成和药物化学中具有重要价值。Boc 保护基的存在使其在酸性条件下稳定，同时可通过脱保护反应释放游离吲哚，便于后续官能团化。3 位甲酰基可作为关键反应位点，参与缩合、还原或亲核加成等反应，是构建复杂杂环化合物（如生物碱或药物中间体）的重要前体。

3. 主要应用领域与具体用途

1-Boc-5-甲基-3-甲酰基吲哚广泛应用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中，它是制备抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物（如 5-HT 受体调节剂）的关键中间体。此外，还可用于荧光染料、配体设计及材料科学的分子构建。其高反应性使其在组合化学和多步合成中具有显著优势。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体（如氮气）以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套和护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明，其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水。

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 ≥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，操作时需遵循 GHS 标准，标识为 GHS05（腐蚀性）和 GHS07（刺激性）。废弃处理需符合当地环保法规，避免直接排放。

（全文共计 436 字）