

1-Boc-5-(羟基甲基)-1H-吲哚

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 5-(hydroxymethyl) indole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-5-(羟基甲基)-1H-吲哚
CAS 号	279255-90-2
分子式	C ₁₄ H ₁₇ N ₃ O ₃
分子量	247.29
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Boc-5-(羟基甲基)-1H-吲哚 (化学名称: tert-butyl 5-(hydroxymethyl)indole-1-carboxylate) 是一种重要的吲哚类衍生物, 其 CAS 号为 279255-90-2, 分子式为 C₁₄H₁₇N₃O₃, 分子量为 247.29。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构特征为吲哚环的 1 位被 Boc (叔丁氧羰基) 保护, 5 位带有羟甲基官能团, 这种结构使其在有机合成和药物化学中具有较高的反应活性和选择性。

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, 在生物化学和药物研发中具有广泛的应用价值。吲哚结构是许多天然产物和药物的核心骨架, 例如血清素、褪黑素和某些抗癌药物。Boc 保护基的引入增强了化合物的稳定性, 便于后续的官能团转化。羟甲基的存在为进一步衍生化提供了便利, 可用于构建更复杂的分子结构, 如肽类化合物或小分子抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

1-Boc-5-(羟基甲基)-1H-吲哚主要用于医药中间体和有机合成领域。在药物研发中, 它是构建吲哚类活性分子的关键前体, 可用于合成抗肿瘤、抗炎或神经活性化合物。此外, 该化合物还可作为荧光探针或生物标记物的合成原料, 在化学生物学研究中发挥重要作用。其高纯度和稳定性使其适用于高通量筛选和结构-活性关系研究。

4. 储存条件与使用建议

该产品应密封保存于干燥、避光的环境中, 推荐储存温度为 2-8° C, 长期储存建议置于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。在操作过程中需佩戴防护手套和护目镜, 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) 和氯仿, 微溶于甲醇, 难溶于水。

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%。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应在通风良好的环境下进行。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。