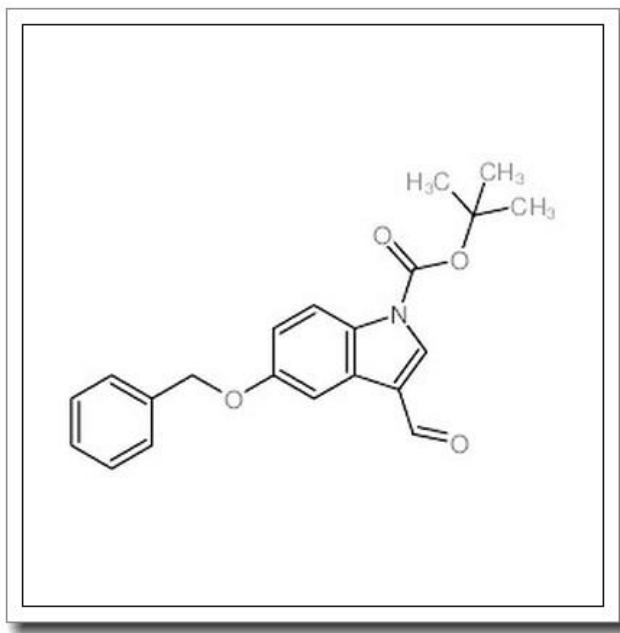


1-Boc-5-苄氧基-3-甲酰基吲哚

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-formyl-5-phenylmethoxyindole-1-carboxylate
中文名称	1-Boc-5-苄氧基-3-甲酰基吲哚
CAS 号	914348-98-4
分子式	C ₂₁ H ₂₁ N ₀₄
分子量	351.396
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 3-formyl-5-phenylmethoxyindole-1-carboxylate (1-Boc-5-苄氧基-3-甲酰基吲哚) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 914348-98-4, 分子式为 C₂₁H₂₁N₀₄, 分子量为 351.396。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, 纯度超过 96%, 具有吲哚骨架结构, 同时含有 Boc 保护基团、甲酰基和苄氧基官能团。其化学性质稳定, 但在强酸或强碱条件下可能发生水解或脱保护反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成和药物化学中具有重要价值。甲酰基可作为活性位点参与缩合、还原或亲核加成反应, 而 Boc 保护基团在肽类或杂环化合物合成中提供临时保护功能。苄氧基的存在增强了分子的脂溶性, 使其在跨膜传递或药物载体设计中具有潜在应用。其结构特征使其成为构建复杂生物活性分子 (如抗癌或抗炎药物) 的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

1-Boc-5-苄氧基-3-甲酰基吲哚主要用于以下领域: 一是药物研发, 作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的合成前体; 二是材料科学, 用于制备功能化高分子单体; 三是生物标记物开发, 其甲酰基可与氨基化合物形成希夫碱连接。具体应用案例包括抗肿瘤候选药物的结构修饰, 以及荧光探针的骨架构建。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用前需恢复至室温并干燥处理, 反应体系中需严格控制水分含量。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF, 浓度不超过 10 mM 以避免自聚。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。

MSDS 显示其 LD50 (大鼠口服) >2000 mg/kg, 属于低毒类物质, 但废弃物需按危险化学品规范处置。意外接触时需立即用大量清水冲洗, 并就医检查。