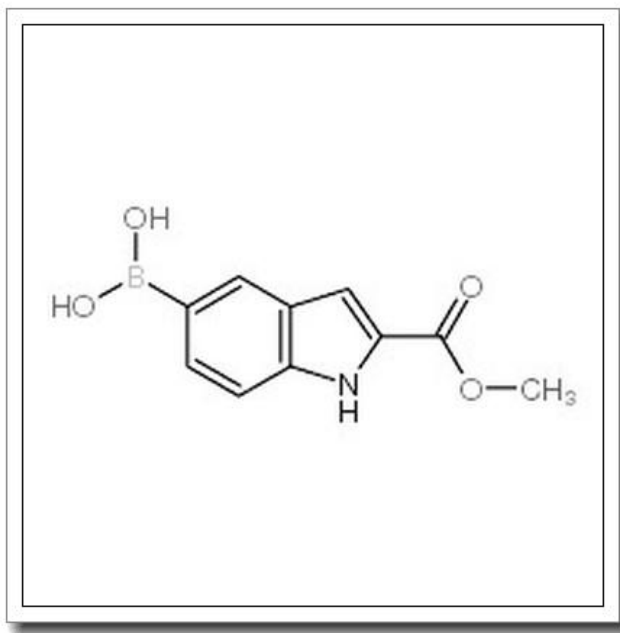


2-甲氧基羰基吲哚-5-硼酸

(2-methoxycarbonyl-1H-indol-5-yl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2-methoxycarbonyl-1H-indol-5-yl)boronic acid
中文名称	2-甲氧基羰基吲哚-5-硼酸
CAS 号	284660-86-2
分子式	C ₁₀ H ₁₀ BN ₀₄
分子量	219.002
纯度	>96%

产品说明

2-甲氧基羰基吲哚-5-硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(2-methoxycarbonyl-1H-indol-5-yl)boronic acid, CAS 号为 284660-86-2, 分子式 C₁₀H₁₀BN₀₄, 分子量 219.002, 是一种含硼酸基团的吲哚衍生物。其结构特征为吲哚环 5 位取代的硼酸基团与 2 位甲氧基羰基的组合, 赋予其独特的反应活性。外观通常为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96% (HPLC 测定), 易溶于极性有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 该产品可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃高效构建碳-碳键, 是合成复杂杂环化合物的关键中间体。其吲哚骨架与药物活性分子结构高度契合, 硼酸基团则为靶向修饰提供反应位点, 在蛋白酶抑制剂、激酶调节剂等药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发: 用于构建抗癌、抗炎药物先导化合物, 如拓扑异构酶抑制剂的核心结构修饰。
- 3.2 材料科学: 作为有机电致发光材料 (OLED) 的前体, 参与合成含吲哚单元的共轭聚合物。
- 3.3 化学合成: 在过渡金属催化反应中作为硼酸供体, 用于多肽模拟物及天然产物全合成。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避免光照与湿气。开封后建议分装使用, 剩余粉末需充氮密封。溶解时优先选用无水 DMSO, 反应体系需严格除氧。建议佩戴防尘口罩、护目镜及丁腈手套操作, 避免吸入或皮肤直接接触。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制: 通过 HPLC、NMR 及元素分析确保化学纯度与结构一致性, 批次间

RSD<1%。

5.2 安全数据：急性毒性 LD50（大鼠经口）>500 mg/kg，对眼睛和呼吸道有轻微刺激性。

5.3 应急处理：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗 15 分钟，误吸入需转移至空气新鲜处，必要时就医。废弃物应作为有害化学品处置，符合当地环保法规。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版 MSDS 并制定风险评估方案。