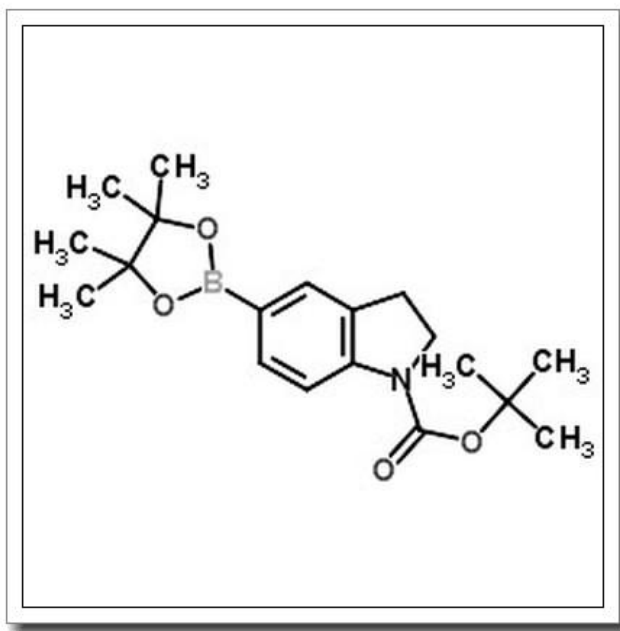


1-BOC-吲哚啉-5-硼酸频那醇酯

tert-butyl 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,3-dihydroindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,3-dihydroindole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-BOC-吲哚啉-5-硼酸频那醇酯
CAS 号	837392-67-3
分子式	C ₁₉ H ₂₈ BN ₀ O ₄
分子量	345.241
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-BOC-吲哚啉-5-硼酸频那醇酯 (CAS 号: 837392-67-3) 是一种重要的有机硼酸酯类化合物, 化学名称为 tert-butyl 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,3-dihydroindole-1-carboxylate。其分子式为 C₁₉H₂₈BN₀₄, 分子量为 345.241, 纯度通常高于 96%。该化合物在常温下为白色至类白色固体, 具有良好的化学稳定性, 可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、四氢呋喃和乙醚, 但不溶于水。其结构中的硼酸频那醇酯基团和 BOC 保护基使其在有机合成中具有较高的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

1-BOC-吲哚啉-5-硼酸频那醇酯是 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 广泛应用于药物化学和材料科学领域。硼酸酯基团能够与卤代芳烃或芳基三氟甲磺酸酯在钯催化剂作用下高效偶联, 构建碳-碳键。此外, BOC 保护基的存在使其在合成过程中易于脱保护, 从而进一步衍生化。该化合物在构建吲哚啉类衍生物中具有重要作用, 是合成多种生物活性分子 (如激酶抑制剂和 GPCR 配体) 的重要砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物;
- 用于构建复杂杂环化合物, 如吲哚啉类衍生物;
- 在材料科学中用于合成有机光电材料;
- 作为探针分子用于生物标记和化学生物学研究。

4. 储存条件与使用建议

为确保产品的稳定性和活性, 建议在以下条件下储存和使用:

- 储存于 -20° C 或更低的干燥环境中, 避免光照和潮湿;
- 使用前需恢复至室温并避免反复冻融;

- 在惰性气体（如氮气或氩气）保护下操作，以防止氧化；
- 溶解时建议使用干燥的有机溶剂，并在反应前充分除氧。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，纯度>96%。使用时需注意以下安全事项：

- 避免吸入粉尘或接触皮肤和眼睛，操作时需佩戴防护手套、护目镜和实验服；
- 在通风良好的环境中使用，避免形成粉尘；
- 如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医；
- 废弃物需按照当地法规处理，不可随意排放。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。