

# 3-溴-2-甲基吲哚-1-羧酸叔丁酯

*tert-butyl 3-bromo-2-methylindole-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-bromo-2-methylindole-1-carboxylate
中文名称	3-溴-2-甲基吲哚-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	775305-12-9
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> BrN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	310.186
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-溴-2-甲基吲哚-1-羧酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3-溴-2-甲基吲哚-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 3-bromo-2-methylindole-1-carboxylate) 是一种重要的吲哚类衍生物，化学式为  $C_{14}H_{16}BrNO_2$ ，分子量为 310.186，CAS 号为 775305-12-9。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有典型的吲哚环结构，叔丁氧羰基 (Boc) 保护基增强了其稳定性，溴原子和甲基的引入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

作为吲哚类化合物的修饰衍生物，该产品在药物化学和生物活性分子合成中具有重要价值。吲哚骨架广泛存在于天然生物碱和药物分子中，溴原子的存在使其可作为关键中间体参与偶联反应（如 Suzuki 偶联）、亲核取代等反应，而 Boc 保护基可在酸性条件下脱除，便于进一步官能团化。其在构建复杂杂环体系和生物活性分子方面具有不可替代的作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中，常用于合成抗肿瘤、抗病毒或中枢神经系统药物候选分子；在材料科学中，可作为功能化吲哚类材料的合成前体。具体用途包括：作为关键中间体用于吲哚-2-甲酸衍生物的制备、参与多步合成中的保护-脱保护策略，以及作为荧光探针或配体的构建模块。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中避光保存，长期储存需充入惰性气体（如氮气）。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛（如氩气）下操作，避免接触强氧化剂或强酸。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，建议在通风橱中配制溶液。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，并提供 COA（质量分析证书）。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，操作时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置，避免释放至环境中。

（注：实际使用前请务必查阅最新版 MSDS 并遵循实验室安全规程。）