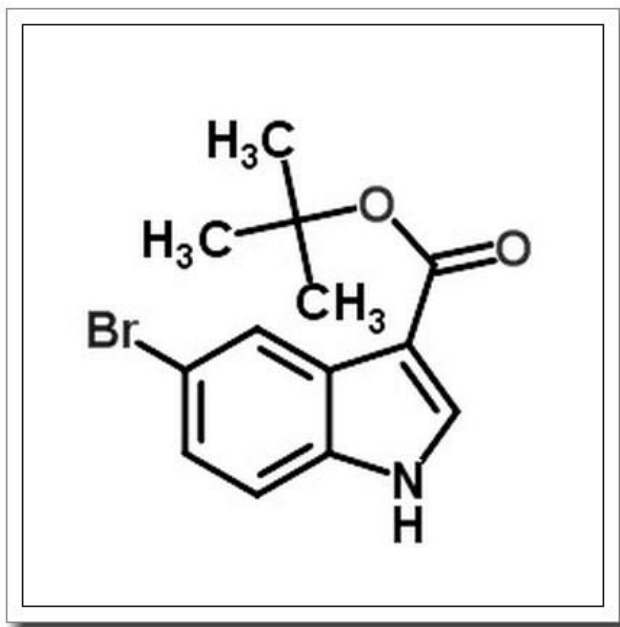


# 5-溴-1H-吲哚-3-羧酸叔丁酯

*tert-Butyl 5-bromo-1H-indole-3-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 5-bromo-1H-indole-3-carboxylate</i>
中文名称	5-溴-1H-吲哚-3-羧酸叔丁酯
CAS 号	1033265-51-8
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> BrNO <sub>2</sub>
分子量	296.16
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-溴-1H-吲哚-3-羧酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-溴-1H-吲哚-3-羧酸叔丁酯（化学名称：tert-Butyl 5-bromo-1H-indole-3-carboxylate）是一种重要的吲哚类衍生物，CAS 号为 1033265-51-8，分子式为  $C_{13}H_{14}BrNO_2$ ，分子量为 296.16。该化合物为白色至浅黄色结晶或粉末，纯度通常大于 96%。其结构中的溴原子和叔丁酯基团赋予其独特的反应活性，使其成为有机合成和药物化学中的关键中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚骨架的衍生物，在生物活性分子构建中具有重要作用。吲哚结构广泛存在于天然产物和药物分子中，例如血清素、褪黑素和多种抗癌药物。5-溴取代基增强了分子的亲电性，便于后续的偶联或取代反应，而叔丁酯基团则提供了良好的保护基功能，适合在多步合成中稳定羧酸基团。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

5-溴-1H-吲哚-3-羧酸叔丁酯主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中，它是构建抗肿瘤、抗病毒和中枢神经系统药物的重要中间体。此外，该化合物可用于荧光染料、农用化学品以及复杂天然产物的全合成。其高反应活性使其在 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应中表现优异。

#### 4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉的环境中，推荐储存温度为 2-8° C，避免光照和潮湿。使用时应穿戴防护手套、护目镜和实验服，在通风良好的化学通风橱中操作。开封后建议尽快使用，剩余产品需充入惰性气体（如氮气）保护，以防止降解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度大于 96%。安全信息方面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时需避免直接接触。如不慎接触，应

立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

以上信息仅供参考，具体实验条件请根据实际需求调整。