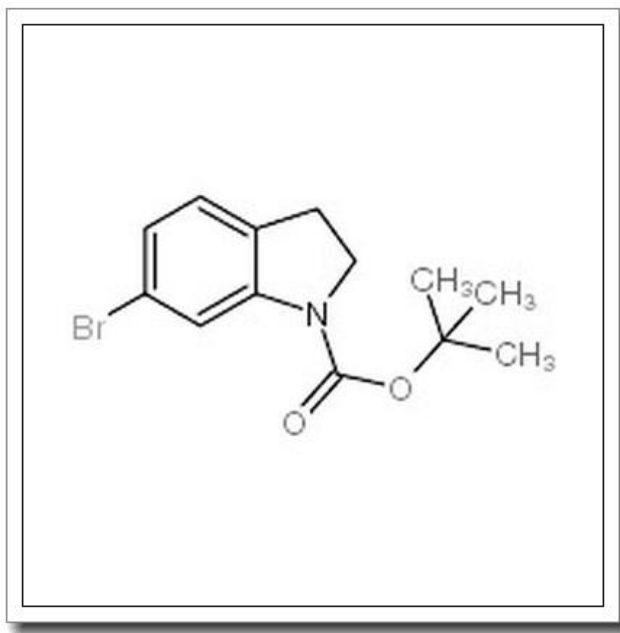


6-溴吲哚啉-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 6-bromo-2,3-dihydroindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 6-bromo-2,3-dihydroindole-1-carboxylate
中文名称	6-溴吲哚啉-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	214614-97-8
分子式	C ₁₃ H ₁₆ BrNO ₂
分子量	298.176
纯度	>96%

产品说明

6-溴吲哚啉-1-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-溴吲哚啉-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 6-bromo-2,3-dihydroindole-1-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, 化学式为 $C_{13}H_{16}BrNO_2$, 分子量为 298.176。该化合物为白色至浅黄色结晶或粉末, CAS 号为 214614-97-8, 纯度高于 96%。其结构包含吲哚啉骨架和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基, 溴原子的引入增强了其反应活性, 适用于多种官能团转化。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在药物化学和有机合成中具有重要价值。Boc 保护基可选择性脱除, 为后续修饰提供便利, 而溴原子可作为偶联反应的位点, 参与 Suzuki、Buchwald-Hartwig 等交叉偶联反应。其吲哚啉结构是许多生物活性分子的核心骨架, 例如抗肿瘤、抗炎和神经调节剂类药物的合成前体。

3. 主要应用领域与具体用途

6-溴吲哚啉-1-羧酸叔丁酯广泛应用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中, 它是构建吲哚类衍生物的关键中间体, 可用于制备激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂等。此外, 在材料科学中, 该化合物可用于合成功能性有机材料或光电材料单体。

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) 以保持稳定性。使用时需在干燥惰性气氛下操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明, 其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 不推荐直接与水或醇类溶剂混合。

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 $\geq 96\%$ 。使用时需穿戴防护手套、护目镜及实验服, 避免吸入粉尘或皮肤接触。安全数据表 (SDS) 显示, 该化合物可能

对眼睛和呼吸道有刺激性，操作应在通风橱中进行。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：实际应用中请以最新实验数据和法规要求为准。）