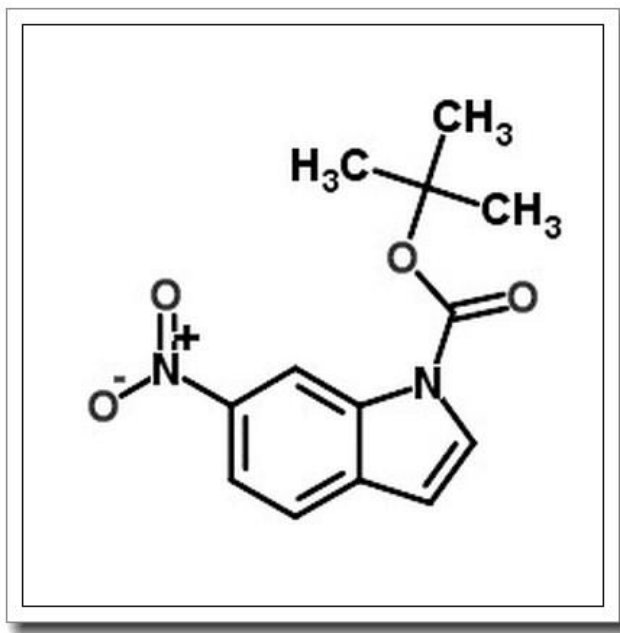


6-硝基-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 6-nitroindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 6-nitroindole-1-carboxylate
中文名称	6-硝基-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	219552-64-4
分子式	C ₁₃ H ₁₄ N ₂ O ₄
分子量	262.261
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

6-硝基-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 6-nitroindole-1-carboxylate) 是一种重要的吲哚类衍生物, CAS 号为 219552-64-4, 分子式为 C₁₃H₁₄N₂O₄, 分子量为 262.261。该化合物为淡黄色至黄色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中的硝基和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基赋予了其独特的化学性质, 使其在有机合成和药物化学中具有广泛的应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚类衍生物, 是构建复杂生物活性分子的关键中间体。吲哚骨架广泛存在于天然产物和药物分子中, 具有抗菌、抗炎、抗肿瘤等生物活性。6-硝基-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯中的硝基可通过还原反应转化为氨基, 进一步用于合成多肽、杂环化合物及药物分子。Boc 保护基的存在使其在酸性条件下易于脱保护, 为后续官能团化提供了便利。

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, 它可作为合成抗肿瘤药物、抗病毒药物及中枢神经系统药物的中间体。此外, 它还用于材料科学中功能分子的构建, 如荧光染料和光电材料的合成。具体用途包括但不限于: 作为吲哚类化合物的前体、用于多步合成中的关键步骤、以及作为研究工具用于生物活性分子的结构修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。储存温度应控制在 2-8° C, 以延长其稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强氧化剂或强酸接触。开封后应尽快使用, 剩余部分需重新密封保存。实验操作时应佩戴防护手套、护目镜等个人防护装备, 确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度大于 96%。使用前建议进行核磁共振

(NMR) 或质谱 (MS) 分析以确认结构。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不慎接触, 应立即用大量清水冲洗, 并寻求医疗帮助。废弃物需按照当地法规处理, 不可随意丢弃。