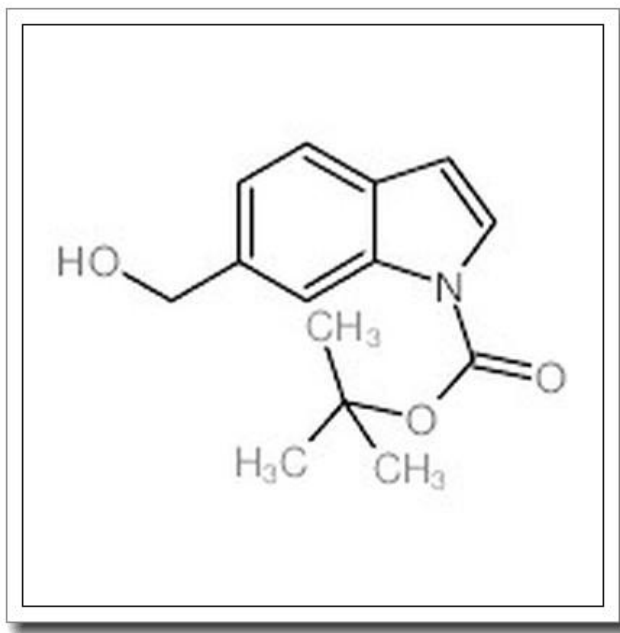


6-(羟基甲基)-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 6-(hydroxymethyl)-1H-indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 6-(hydroxymethyl)-1H-indole-1-carboxylate</i>
中文名称	6-(羟基甲基)-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	354587-72-7
分子式	C ₁₄ H ₁₇ N ₃ O ₃
分子量	247.29
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

6-(羟基甲基)-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯 (tert-Butyl 6-(hydroxymethyl)-1H-indole-1-carboxylate) 是一种重要的吲哚类衍生物, CAS 号为 354587-72-7, 分子式为 C₁₄H₁₇N₃O₃, 分子量为 247.29。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%。其结构中的叔丁酯基和羟基甲基官能团赋予其良好的反应活性, 可作为有机合成中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有广泛的应用潜力。吲哚骨架是许多天然产物和药物的核心结构, 而羟基甲基的引入使其易于进一步修饰, 例如通过酯化、氧化或偶联反应生成更复杂的分子。其在药物研发中常用于构建具有生物活性的吲哚类化合物, 如 5-羟色胺受体调节剂或激酶抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

6-(羟基甲基)-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯主要用于医药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物的重要中间体。此外, 该化合物还可用于荧光探针的制备或作为功能化聚合物的单体。具体用途包括但不限于: 小分子药物库构建、靶向药物设计以及生物标记物的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度为 2-8° C, 以保持其稳定性。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 密封保存, 避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 可根据实验需求选择合适的溶剂。

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 ≥ 96%。使用前建议进行核磁共振 (NMR) 或质谱 (MS) 验证以确保结构准确性。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，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，不可随意排放。