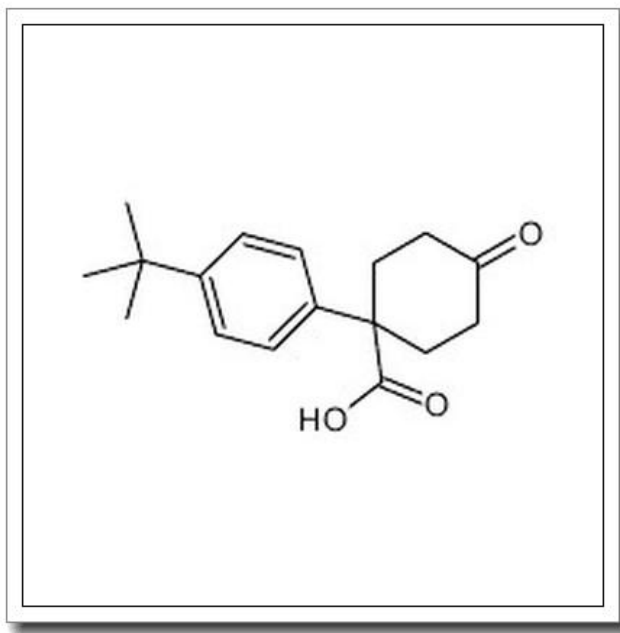


# N-boc-3-溴-6-硝基吲哚

*1-(4-tert-butylphenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(4-tert-butylphenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid
中文名称	N-boc-3-溴-6-硝基吲哚
CAS 号	1246471-29-3
分子式	C <sub>17</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub>
分子量	274.355
纯度	>96%

## 产品说明

### 1-(4-叔丁基苯基)-4-氧代环己烷-1-羧酸产品说明书

#### 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-(4-tert-butylphenyl)-4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid, 中文别称 N-boc-3-溴-6-硝基吡啶, CAS 登记号 1246471-29-3。该化合物分子式为 C<sub>17</sub>H<sub>22</sub>O<sub>3</sub>, 分子量 274.355, 常温下呈白色至类白色结晶粉末, 纯度经 HPLC 检测 ≥96%。其结构中同时含有羧酸基团和酮基团, 使其兼具亲水性与疏水性, 在有机溶剂如 DMSO、甲醇中具有良好溶解性 (20mg/mL), 水溶性较低 (<1mg/mL)。

#### 生物化学功能与重要性

作为重要的有机合成中间体, 该分子中的活性羧基可参与酯化、酰胺化等反应, 而环己酮结构易发生亲核加成。其特殊结构使其在药物化学中具有显著价值, 特别是作为非甾体抗炎药 (NSAIDs) 衍生物开发的前体化合物。叔丁基苯基的引入增强了分子的脂溶性, 有利于穿透细胞膜, 在生物活性分子筛选中表现出独特的构效关系。

#### 主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 用于 COX-2 选择性抑制剂的合成研究
2. 材料科学: 作为液晶材料的改性单体
3. 有机合成: 构建含环己烷骨架的复杂分子
4. 生化研究: 开发新型荧光探针的中间体

典型应用包括但不限于: 通过羧基活化制备酰胺类衍生物, 或利用酮基进行脞化反应构建杂环体系。

#### 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中, 开封后需充氮密封保存。使用前需室温平衡 30 分钟以避免结露。工作溶液建议现配现用, 若需保存应置于-80℃

不超过 72 小时。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤，如发生接触应立即用大量清水冲洗。

#### 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，批次纯度通过 HPLC 检测。安全数据表明该物质可能引起眼睛刺激（H319），操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。废弃物处理需符合当地危险化学品处置规范，不可直接排入下水系统。运输分类为非危险品，但建议使用防震包装避免容器破损。