

tert-butyl 4-methoxyindole-1-carboxylate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-methoxyindole-1-carboxylate
产品目录号	
CAS 号	1093759-59-1
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

本品为 tert-butyl 4-methoxyindole-1-carboxylate (叔丁基-4-甲氧基吲哚-1-甲酸酯), 化学式为 C₁₄H₁₇N₁O₃, 分子量 247.29, CAS 号 1093759-59-1。其结构特征为吲哚环 1 位被叔丁氧羰基 (Boc) 保护, 4 位含甲氧基取代基, 是一种重要的吲哚类衍生物。产品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚骨架的修饰物, 兼具 Boc 保护基的稳定性和甲氧基的电子效应, 在有机合成中可作为关键中间体。其吲哚核心结构广泛存在于天然生物活性分子中, 因此常用于构建药物分子或功能材料的前体, 尤其在神经科学、抗肿瘤药物研发领域具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和材料科学领域。在药物研发中, 可作为合成 5-HT 受体调节剂、激酶抑制剂等靶向化合物的砌块; 在材料化学中, 可用于制备荧光探针或光电功能分子。具体实验用途包括: 多肽固相合成中的保护基策略、杂环化合物的官能团化反应, 以及作为不对称催化反应的底物。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解推荐使用无水级有机溶剂, 反应体系中需严格控制水分以避免 Boc 基团脱落。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 核磁共振 (NMR) 与质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD₅₀ 未明确), 但仍可能引起皮肤或眼部刺激。若不慎接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合有机有害化学品规范, 禁止直接排放至环境。

(注: 实际应用中请以具体实验方案和最新安全数据表为准。)