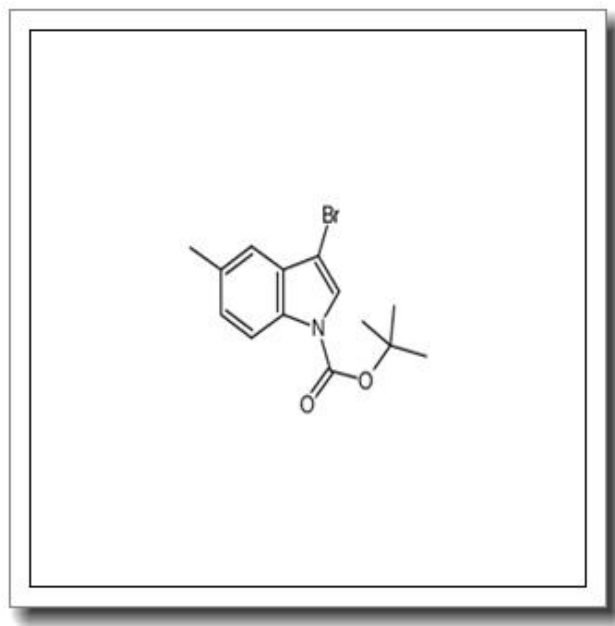


1-Boc-3-溴-5-甲基吲哚

tert-butyl 3-bromo-5-methylindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-bromo-5-methylindole-1-carboxylate
中文名称	1-Boc-3-溴-5-甲基吲哚
CAS 号	914349-24-9
分子式	C ₁₄ H ₁₆ BrNO ₂
分子量	310.186
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 3-bromo-5-methylindole-1-carboxylate (1-Boc-3-溴-5-甲基吲哚) 是一种重要的吲哚类衍生物，化学式为 $C_{14}H_{16}BrNO_2$ ，分子量为 310.186，CAS 号为 914349-24-9。该化合物以白色至淡黄色结晶或粉末形式存在，纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构特征为吲哚环的 3 位被溴原子取代，1 位通过 Boc (叔丁氧羰基) 保护，5 位带有甲基基团。这种修饰使其兼具反应活性和稳定性，适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类化合物的关键中间体，1-Boc-3-溴-5-甲基吲哚在药物化学和材料科学中具有重要价值。吲哚骨架广泛存在于天然生物活性分子中，如色氨酸和血清素。溴原子的引入增强了其亲电取代反应能力，而 Boc 保护基则提高了氨基的稳定性，便于后续衍生化。该化合物常用于构建复杂杂环体系，是抗癌、抗病毒药物研发中的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体、有机合成和材料科学领域。在药物研发中，它可作为构建多靶点抑制剂的核心片段，例如用于激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的合成。在材料科学中，其刚性吲哚结构可用于设计荧光探针或光电材料。此外，它还常用于学术研究中的交叉偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 和环化反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存，长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在干燥惰性氛围 (如氩气手套箱) 中操作，防止 Boc 基团水解。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF 等极性非质子溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保批次间一致性。安全信息方面，该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口

罩。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。

(全文共 436 字)