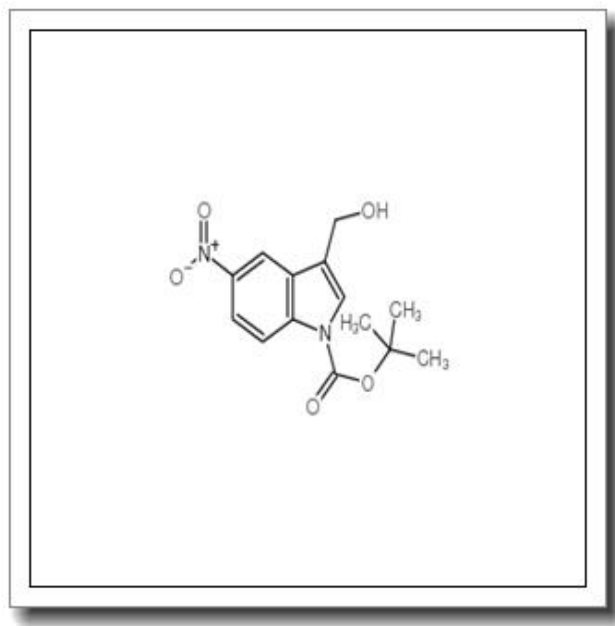


1-Boc-3-羟基甲基-5-硝基吲哚

tert-butyl 3-(hydroxymethyl)-5-nitroindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-(hydroxymethyl)-5-nitroindole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-3-羟基甲基-5-硝基吲哚
CAS 号	914349-07-8
分子式	C ₁₄ H ₁₆ N ₂ O ₅
分子量	292.287
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl 3-(hydroxymethyl)-5-nitroindole-1-carboxylate (1-Boc-3-羟基甲基-5-硝基吲哚)，CAS 号为 914349-07-8，分子式为 C₁₄H₁₆N₂O₅，分子量为 292.287。其结构包含吲哚骨架、硝基取代基及 Boc 保护基团，纯度 ≥96% (HPLC)。该化合物在常温下稳定，易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类衍生物，本品是重要的医药中间体，其硝基和 Boc 保护基团赋予其高反应活性，可用于构建复杂杂环结构。羟基甲基的引入增强了分子修饰灵活性，使其在靶向药物设计中具有关键作用，尤其在抗肿瘤、抗炎及神经药物研发中表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于药物化学与有机合成领域，具体用途包括：

- (1) 作为关键中间体用于合成 5-硝基吲哚类抗癌候选药物；
- (2) 通过 Boc 脱保护及后续偶联反应制备小分子抑制剂；
- (3) 在荧光探针开发中作为信号基团载体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照与潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在惰性气氛（如氮气）下操作，推荐以 DMSO 配制母液（浓度 ≤10 mM），现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检，符合国际标准。安全数据：

- (1) 潜在刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜；
- (2) 避免吸入粉尘，应在通风橱中处理；

(3) 废弃物需按危险化学品规范处置。

紧急处理：如接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。