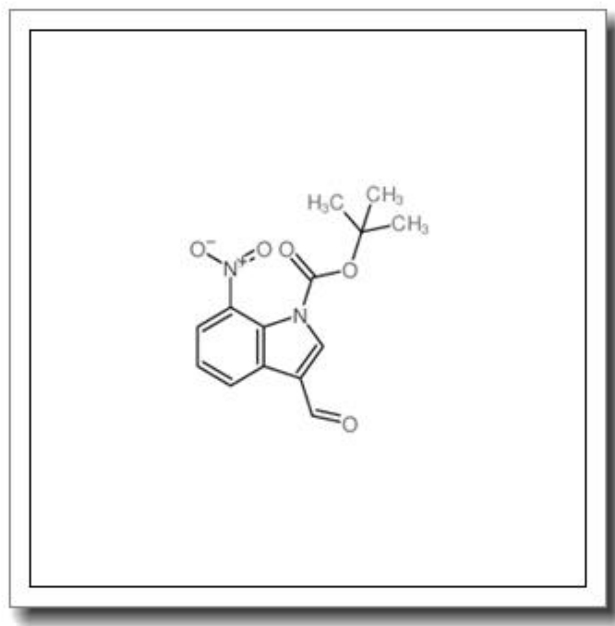


1-Boc-7-硝基-3-甲酰基吲哚

tert-butyl 3-formyl-7-nitroindole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-formyl-7-nitroindole-1-carboxylate
中文名称	1-Boc-7-硝基-3-甲酰基吲哚
CAS 号	914348-97-3
分子式	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₅
分子量	290.271
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 1-Boc-7-硝基-3-甲酰基吲哚（化学名称：tert-butyl 3-formyl-7-nitroindole-1-carboxylate），CAS 号 914348-97-3，分子式 C₁₄H₁₄N₂O₅，分子量 290.271，是一种高纯度（≥96%）的吲哚衍生物。其结构特征为吲哚环 1 位被 Boc 保护基修饰，3 位带有甲酰基，7 位引入硝基，赋予其独特的反应活性。该化合物在常温下为固体，需避光保存，其甲酰基和硝基使其成为多官能团合成砌块，广泛应用于有机合成及药物研发领域。

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-7-硝基-3-甲酰基吲哚在生物碱合成和药物分子设计中具有重要作用。其 Boc 保护基可选择性脱除，甲酰基可参与缩合或还原反应，硝基则可通过还原转化为氨基，进一步拓展结构多样性。这类结构单元常见于抗肿瘤、抗病毒及神经系统药物研发中，例如作为激酶抑制剂或 5-HT 受体调节剂的合成前体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体、材料科学及学术研究。在药物化学中，可用于构建含吲哚骨架的候选药物分子，如天然产物全合成或结构修饰。在材料领域，可作为功能化聚合物的单体或交联剂。实验室中常用于研究硝基芳香化合物的还原机理或甲酰基的亲核加成反应，为有机合成方法学开发提供模型底物。

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，以防降解。使用时应在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂，水溶性较差，建议根据反应体系选择适宜溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，MS 和 NMR 确证结构。安全数据表明，其具有刺激

性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若接触皮肤，应立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。详细毒理学数据可参考产品安全技术说明书（MSDS）。