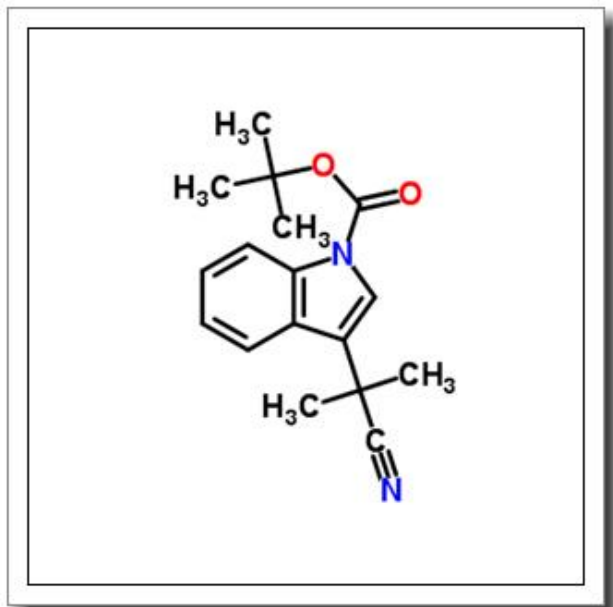


3-(1-氰基-1-甲基乙基)-1H-吲哚-1-甲酸叔丁酯

tert-butyl 3-(2-cyanopropan-2-yl)indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-(2-cyanopropan-2-yl)indole-1-carboxylate</i>
中文名称	3-(1-氰基-1-甲基乙基)-1H-吲哚-1-甲酸叔丁酯
CAS 号	380626-46-0
分子式	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ O ₂
分子量	284.353
纯度	≥96%

产品说明

3-(1-氰基-1-甲基乙基)-1H-吲哚-1-甲酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl 3-(2-cyanopropan-2-yl)indole-1-carboxylate, 是一种含吲哚骨架的有机化合物, CAS 号为 380626-46-0。其分子式为 C₁₇H₂₀N₂O₂, 分子量 284.353, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有吲哚环的典型紫外吸收特性, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和氰基赋予其独特的化学稳定性与反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类衍生物, 该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其 Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除, 而氰基可作为后续官能团转化的反应位点, 在药物化学中常用于蛋白酶抑制剂、激酶调节剂等靶向药物的合成。该结构单元对研究细胞信号转导和酶活性调控具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域:

- 3.1 医药中间体: 用于合成抗肿瘤、抗炎及神经系统药物中的吲哚胺类活性成分。
- 3.2 PROTAC 技术: 作为连接子 (linker) 组分参与靶向蛋白降解分子的设计。
- 3.3 材料科学: 作为荧光探针前体或光电材料修饰基团。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存: 密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中, 避免光照与湿气。
- 4.2 使用: 建议在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 溶解时优先选用无水级溶剂。
- 4.3 稳定性: 常温下可稳定存放 12 个月, 长期储存需定期检测纯度。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。
- 5.2 安全警示:

- 危害分类: 刺激性物质 (皮肤接触可能引起红肿)
- 操作防护: 需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套
- 应急处理: 接触皮肤时立即用大量清水冲洗, 吸入粉尘需转移至通风处

5.3 废弃物处置: 按危险化学品规范处理, 不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用需进一步实验验证。