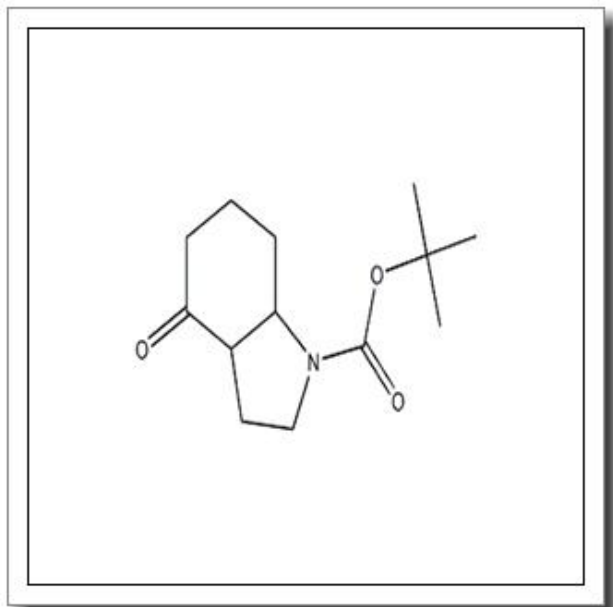


# (3AR,7AR)-4-氧代八氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯

*tert-butyl 4-oxo-octahydroindole-1-carboxylate*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | tert-butyl 4-oxo-octahydroindole-1-carboxylate                |
| 中文名称  | (3AR, 7AR)-4-氧代八氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯                               |
| CAS 号 | 543910-34-5   |
| 分子式   | C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> |
| 分子量   | 239.31074   |
| 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(3AR, 7AR)-4-氧代八氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯，英文名 tert-butyl 4-oxo-octahydroindole-1-carboxylate，CAS 号 543910-34-5。分子式 C<sub>13</sub>H<sub>21</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量 239.31074，纯度 ≥96%。其结构含八氢吲哚骨架与叔丁氧羰基保护基，具有立体特异性（3AR, 7AR 构型），在有机溶剂如甲醇、二氯甲烷中溶解性良好，但难溶于水。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成生物活性分子的关键中间体，尤其用于构建含吲哚啉酮结构的药物分子。叔丁氧羰基（Boc）保护基的引入可增强其稳定性，便于后续脱保护进行官能团修饰。其 4-氧代结构为衍生化反应（如还原胺化或亲核加成）提供活性位点，在蛋白酶抑制剂和神经递质类似物开发中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：1) 作为手性砌块用于抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）的合成；2) 参与构建中枢神经系统药物（如 5-HT 受体调节剂）的核心骨架；3) 用于天然产物全合成中复杂杂环体系的构建。实验室级产品适用于小规模有机合成及方法学开发。

### 4. 储存条件与使用建议

建议密闭保存于 -20℃ 至 4℃ 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保质期。使用前需恢复至室温并干燥处理，推荐在氩气环境下操作。溶解时优先选用无水级溶剂，反应体系中需严格控制水分含量（≤0.1%）。

### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 ≥96%，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。本品对眼睛和呼吸道有轻微刺激性，操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触皮肤，应立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，避免直接排入环境。安全数据表（SDS）可随货提供。