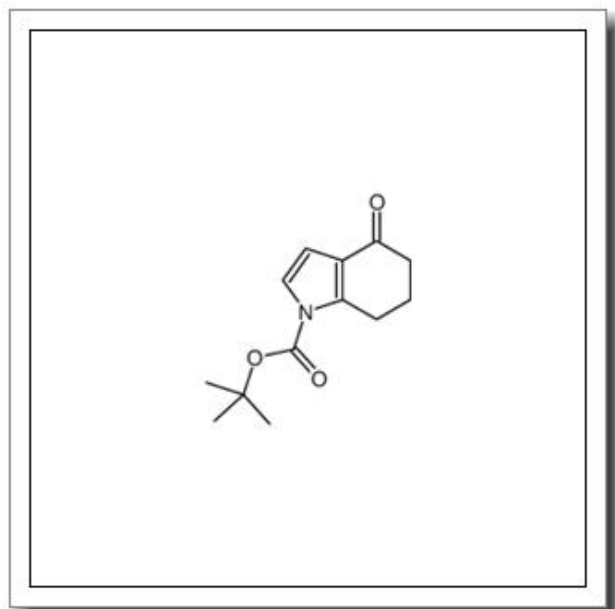


4-氧代-4,5,6,7-四氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-oxo-6,7-dihydro-5H-indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-oxo-6,7-dihydro-5H-indole-1-carboxylate
中文名称	4-氧代-4,5,6,7-四氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	877170-76-8
分子式	C ₁₃ H ₁₇ N ₁ O ₃
分子量	235.279
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 4-oxo-6,7-dihydro-5H-indole-1-carboxylate (4-氧代-4,5,6,7-四氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯)，CAS 号 877170-76-8，分子式 C₁₃H₁₇N₃O₃，分子量 235.279。其结构含吲哚环与叔丁氧羰基 (Boc) 保护基，纯度 ≥96%，易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇，但在水中溶解度较低。该化合物是合成复杂生物活性分子的关键中间体，需避光保存以防降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类衍生物，本品在药物化学中具有重要地位。其结构中的 4-氧代四氢吲哚骨架是多种生物碱和药物活性分子的核心结构，例如 5-HT 受体调节剂和激酶抑制剂。Boc 保护基的存在增强了化合物的稳定性，便于后续脱保护并引入其他官能团，广泛应用于多步有机合成中。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和有机合成领域，具体包括：

- 1) 作为合成抗肿瘤、抗抑郁或抗炎药物的中间体；
- 2) 用于构建含吲哚环的天然产物类似物；
- 3) 在 PROTAC (蛋白降解靶向嵌合体) 技术中作为连接子组分。实验表明，其衍生物可靶向特定蛋白通路，具有潜在治疗价值。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20° C 至 4° C 的密闭容器中，避免光照与湿气。开封后建议充氮保护以延长保质期。使用前需恢复至室温，称量时佩戴防护手套与护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，工作浓度需根据实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度 ≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作应在通风橱中进行。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危

险化学品规范处置。安全数据表（SDS）可随货提供，包含详细毒理学数据（如LD50）和应急处理措施。