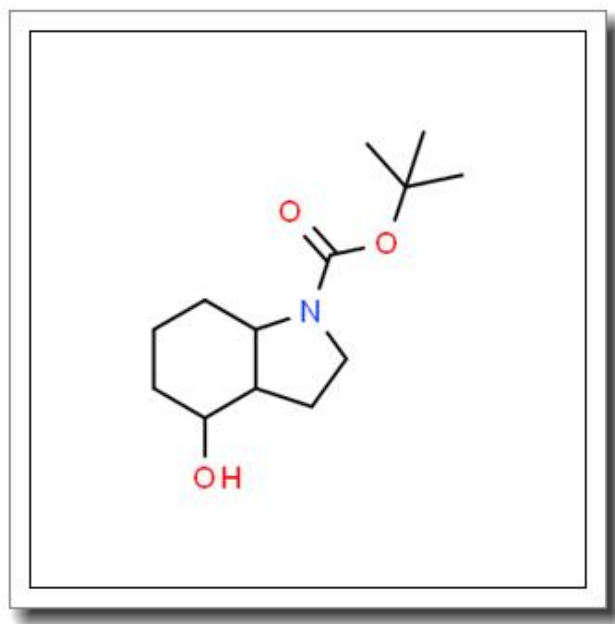


# 4-羟基八氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯

*1H-Indole-1-carboxylic acid, octahydro-4-hydroxy-, 1,1-dimethylethyl ester*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Indole-1-carboxylic acid, octahydro-4-hydroxy-, 1,1-dimethylethyl ester
中文名称	4-羟基八氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1821237-04-0
分子式	C13H23NO3
分子量	241.33
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为 4-羟基八氢-1H-吲哚-1-羧酸叔丁酯 (1H-Indole-1-carboxylic acid, octahydro-4-hydroxy-, 1,1-dimethylethyl ester), CAS 号 1821237-04-0, 分子式 C<sub>13</sub>H<sub>23</sub>N<sub>03</sub>, 分子量 241.33, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有吲哚环的八氢化结构, 并含羟基及叔丁酯基团, 属于修饰型吲哚衍生物。其疏水性叔丁酯基团可增强稳定性, 适合有机合成中的中间体应用。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚类生物碱的结构类似物, 可通过羟基和酯基的化学反应性参与多种生化反应。其八氢化结构降低了母核的平面性, 可能影响与生物靶点的相互作用, 在药物化学中常用于构效关系研究。此外, 叔丁酯保护基在酸性条件下可选择性脱除, 为后续官能团修饰提供便利。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 特别是作为以下关键中间体:

- 神经活性药物 (如 5-HT 受体调节剂) 的合成前体
- 天然产物全合成中构建氢化吲哚骨架
- 蛋白酶抑制剂类化合物的结构修饰

实验室用途包括作为手性合成砌块或用于研究酶催化酯水解反应的模型底物。

### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中, 避免光照及湿度影响。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在干燥惰性气氛下操作, 若用于水相体系建议现配现用。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于甲醇。

### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据:

- 危害标识: H315-H319 (可能造成皮肤和眼刺激)
- 防护措施: 佩戴护目镜及丁腈手套, 通风橱内操作

- 应急处理：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗，眼部接触需用生理盐水持续冲洗 15 分钟

废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证适用性。