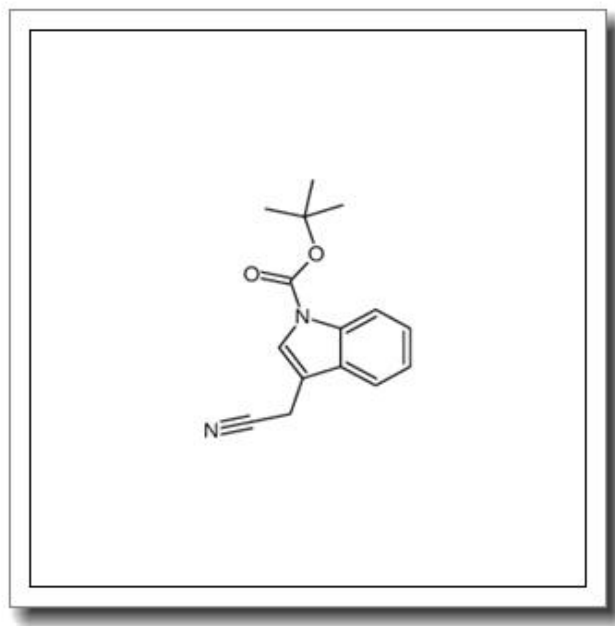


N-Boc-吲哚-3-乙腈

tert-butyl 3-(cyanomethyl)indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-(cyanomethyl)indole-1-carboxylate</i>
中文名称	N-Boc-吲哚-3-乙腈
CAS 号	218772-62-4
分子式	C ₁₅ H ₁₆ N ₂ O ₂
分子量	256.3
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

N-Boc-吲哚-3-乙腈（化学名称：tert-butyl 3-(cyanomethyl)indole-1-carboxylate）是一种重要的吲哚类衍生物，CAS 号为 218772-62-4，分子式为 C₁₅H₁₆N₂O₂，分子量为 256.3。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度通常不低于 96%。其结构中的吲哚环和氰甲基官能团使其具有较高的反应活性，而叔丁氧羰基（Boc）保护基则增强了其在合成中的稳定性。该产品易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯和四氢呋喃，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

N-Boc-吲哚-3-乙腈在有机合成和药物化学中具有重要价值。其吲哚骨架是许多生物活性分子的核心结构，常见于天然产物和药物分子中。Boc 保护基的存在使其在多步合成中能够选择性脱保护，从而避免副反应。氰甲基官能团可作为进一步修饰的位点，例如通过还原、水解或环化反应生成胺、羧酸或杂环化合物。这些特性使其成为构建复杂分子（如抗癌药物、神经活性物质和农用化学品）的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中，它常用于制备吲哚类生物碱、5-羟色胺受体调节剂以及激酶抑制剂。此外，它还可作为荧光探针或标记物的前体，用于生物成像研究。在材料科学中，其衍生物可能用于开发新型有机光电材料。具体实验用途包括但不限于：作为亲核试剂参与偶联反应、通过钯催化反应构建碳-碳键，或作为模板分子用于组合化学库的构建。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、避光的环境中，储存温度以 2-8℃为宜，长期保存可置于惰性气体（如氮气）保护下。开封后应尽快使用，避免反复冻融或暴露于潮湿空气。使用前需恢复至室温并充分干燥，若发现结块或变色应重新检测纯度。实验操作应在通风橱中进行，并佩戴防护手套、护目镜等个人防护装备。溶解时建议优先选择无水有机溶剂，以最大限度减少水解风险。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保纯度 $\geq 96\%$ 。潜在杂质可能包括未反应原料或脱保护产物，使用前可根据需求进一步纯化。安全数据表明，该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应避免直接接触。若不慎吸入或误食，应立即就医并提供安全数据表（SDS）。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学废料回收程序处置。