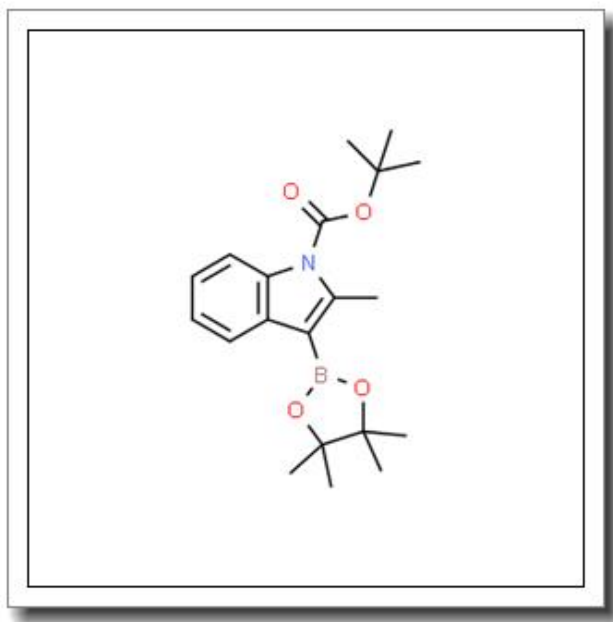


tert-butyl 2-methyl-3-(tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)indole-1-carboxylate

tert-Butyl 2-methyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 2-methyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole-1-carboxylate
中文名称	tert-butyl 2-methyl-3-(tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)indole-1-carboxylate
CAS 号	1627721-62-3
分子式	C ₂₀ H ₂₈ BN ₀₄
分子量	357.25
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 2-methyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole-1-carboxylate，分子式为 C₂₀H₂₈BN₀₄，分子量 357.25。其结构特征为吲哚骨架 2 位甲基取代及 3 位引入频哪醇硼酸酯保护基，1 位 N 原子由叔丁氧羰基 (Boc) 保护。CAS 号 1627721-62-3，纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、THF，对湿气敏感。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是重要的有机硼酸酯中间体，其频哪醇硼酸酯基团在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性，可实现芳基-芳基键的构建。Boc 保护基增强了氮原子的稳定性，使其适用于多步合成中的选择性修饰。作为吲哚类衍生物，在药物化学中常用于构建具有生物活性的杂环体系。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和材料科学领域：

- 作为关键中间体用于合成激酶抑制剂、抗肿瘤化合物等小分子药物
- 用于构建 OLED 材料中的电子传输层分子
- 在交叉偶联反应中作为硼酸前体，需在碱性条件下水解为硼酸后参与反应
- 适用于高通量筛选库的构建

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，-20℃干燥避光保存，有效期 24 个月。使用前需恢复至室温并避免接触水分，建议在手套箱或干燥环境下操作。溶解时优先选用无水级溶剂，反应体系中需添加分子筛除水。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：

- GHS 分类：皮肤刺激（类别 2）、眼睛刺激（类别 2A）
- 防护措施：佩戴护目镜、防化手套，在通风橱中操作

- 应急处理：皮肤接触时用大量清水冲洗 15 分钟，眼睛接触立即用生理盐水冲洗并就医
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理

注：本产品仅供科研用途，不适用于食品、医药或家用领域。具体使用前请查阅最新版 MSDS 并开展风险评估。