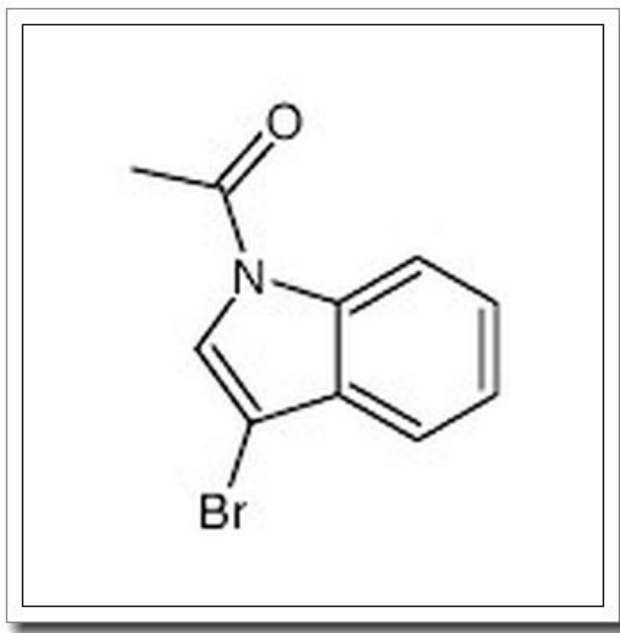


1-(3-溴-1H-吲哚-1-基)乙酮

1-(3-bromoindol-1-yl)ethanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3-bromoindol-1-yl)ethanone
中文名称	1-(3-溴-1H-吲哚-1-基)乙酮
CAS 号	66417-73-0
分子式	C ₁₀ H ₈ BrNO
分子量	238.081
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(3-溴-1H-吲哚-1-基)乙酮 (英文名称: 1-(3-bromoindol-1-yl)ethanone) 是一种有机溴化物, 化学式为 $C_{10}H_8BrNO$, 分子量为 238.081, CAS 号为 66417-73-0。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构特征为吲哚环的 3 位被溴原子取代, 1 位氮原子上连接乙酰基, 具有较高的反应活性, 可作为有机合成中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中主要用于修饰吲哚类骨架, 吲哚结构广泛存在于天然产物和药物分子中, 如色氨酸、血清素等。3-溴吲哚衍生物因其独特的电子效应和空间位阻, 常被用于构建复杂杂环化合物或作为药物研发中的关键片段。其溴原子可作为亲电取代或金属催化偶联反应的位点, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

1-(3-溴-1H-吲哚-1-基)乙酮主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为抗肿瘤、抗病毒或神经活性药物的合成前体。
- 有机合成: 参与 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应, 构建功能化吲哚衍生物。
- 材料科学: 用于制备光电材料或荧光探针的中间体。
- 学术研究: 作为吲哚化学机理研究的模型化合物。

4. 储存条件与使用建议

该产品需避光、密封保存于干燥环境中, 推荐储存温度为 2-8°C。使用时应避免直接接触皮肤或吸入粉尘, 操作需在通风橱中进行。溶解性测试表明, 其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、氯仿等有机溶剂, 微溶于水。建议现配现用, 长期储存需充入惰性气体保护。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）数据以确证结构。根据化学品安全技术说明书（MSDS），该物质可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时需佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。